

Univerzitet u Sarajevu
Prirodno-matematički fakultet
Odsjek za fiziku

KVANTNA MEHANIKA I

UDŽBENIK

2014.

Sadržaj

1 Istorijski uvod i fizikalne osnove kvantne mehanike	1
1.1 Zakoni zračenja	2
1.1.1 Gustoća energije elektromagnetskog polja	3
1.1.2 Koordinatna zavisnost polja u rezonatoru	4
1.1.3 Broj različitih modova polja	5
1.1.4 Srednja energija moda u rezonatoru. Rayleigh-Jeansova i Wienova formula	6
1.1.5 Planckova formula	7
1.1.6 Einsteinovo izvođenje Planckove formule	8
1.1.7 Ekscitacija. Stefan-Boltzmannov zakon i Wienov zakon pomjeranja	9
1.1.8 Specifična toplota sistema materijalnih čestica	11
1.1.9 Zadaci	12
1.2 Kvantiziranje fizikalnih veličina	14
1.2.1 Fotoelektrični efekat	14
1.2.2 Comptonov efekat	18
1.2.3 Linjski spektri i klasifikacija spektralnih linija	20
1.2.4 Franck-Hertzov eksperiment	20
1.2.5 Stern-Gerlachov eksperiment	22
1.2.6 Zadaci	23
1.3 Talasni aspekti čestica	27
1.3.1 De Broglievi talasi	27
1.3.2 Difrakcija talasa materije	32
1.3.3 Statistička interpretacija talasa materije	35
1.3.4 Srednje (očekivane) vrijednosti u kvantnoj mehanici	43
1.3.5 Primjer tri kvantno-mehanička operatora	45
1.3.6 Princip superpozicije u kvantnoj mehanici	46
1.3.7 Heisenbergov princip neodređenosti	47
1.3.8 Zadaci	50
1.4 Dodaci	57

1.4.1	Zadaci sa pismenih ispita iz kvantne mehanike	57
1.4.2	Razvoj korpuskularno-talasnog dualizma elektromagnetskog polja i čestica od klasične do kvantne fizike . . .	59
2	Matematičke osnove kvantne mehanike I	61
2.1	Osobine operatora	61
2.2	Kombinovanje dva operatora	62
2.3	Diracova bra i ket notacija	63
2.4	Svojstvene vrijednosti i svojstvene funkcije	64
2.5	Mjerljivost različitih opservabli u istim trenucima	69
2.6	Operatori položaja i impulsa	71
2.7	Heisenbergove relacije neodređenosti za proizv. opservable .	72
2.8	Operatori momenta impulsa	74
2.9	Kinetička energija	79
2.10	Ukupna (totalna) energija	79
2.11	Vlastiti diferencijali	80
2.12	Razvoj po vlastitim funkcijama	83
2.13	Zadaci	84
3	Schrödingerova jednačina	91
3.1	Očuvanje broja čestica u kvantnoj mehanici	94
3.2	Stacionarna stanja	96
3.3	Osobine stacionarnih stanja	97
3.4	Zadaci sa pismenih ispita iz kvantne mehanike	98
4	Harmonijski oscilator	101
4.1	Jednodimenzionalna Schrödingerova jednačina za harmonijski oscilator	101
4.2	Rješenje Schrödingerove jednačine za harmonijski oscilator .	103
4.3	Opis harmonijskog oscilatora pomoću operatora \hat{a} i \hat{a}^\dagger	111
4.4	Osobine operatora \hat{a} i \hat{a}^\dagger	112
4.5	Predstavljanje hamiltonijana harmonijskog oscilatora pomoću operatora \hat{a} i \hat{a}^\dagger	114
4.6	Interpretacija operatora \hat{a} i \hat{a}^\dagger	114
4.7	Matematički dodatak: Hipergeometrijske funkcije	116
4.7.1	Hipergeometrijska diferencijalna jednačina	116
4.7.2	Konfluentna hipergeometrijska diferencijalna jednačina	118
4.8	Matematički dodatak: Hermiteovi polinomi	119
4.9	Zadaci sa pismenih ispita iz kvantne mehanike	121
5	Prelaz sa klasične na kvantnu mehaniku	123

5.1	Jednačina kretanja za srednje vrijednosti	123
5.2	Ehrenfestov teorem	124
5.3	Konstante kretanja i zakoni očuvanja	125
5.4	Analogija klasičnih Poissonovih zagrada i kvantno-mehaničkih komutatora	126
6	Sferno simetrični potencijal. Vodonikov atom	129
6.1	Schrödingerova jednačina sa Coulombovim potencijalom	129
6.2	Separacija varijabli u sfernim koordinatama	130
6.3	Rješavanje radikalne jednačine za vodonikov atom	130
6.4	Spektar vodonikovog atoma	136
6.5	Struje u vodonikovom atomu	138
6.6	Magnetni moment atoma	139
7	Teorija reprezentacija	141
7.1	Reprezentacija (predstavljanje) operatora	143
7.2	Problem vlastitih vrijednosti	148
7.3	Unitarne transformacije	150
7.4	S matrica	152
7.5	Schrödingerova jednačina u matričnom obliku	154
7.6	Schrödingerova reprezentacija	156
7.7	Heisenbergova reprezentacija	157
7.8	Reprezentacija međudjelovanja	158

Poglavlje 1

Istorijski uvod i fizikalne osnove kvantne mehanike

Kvantna mehanika se razvila tokom prve tri decenije dvadesetog vijeka kao odgovor na neuspjeh klasičnih teorija, kako Newtonove mehanike (I. Newton (Njutn), 1642.-1727.), tako i teorije elektromagnetskog polja, da daju objašnjenje nekih osobina elektromagnetskog zračenja i strukture atoma. Pokazalo se da se pomoću te nove teorije mogu objasniti ne samo struktura i osobine atoma, već i način međusobne interakcije atoma i molekula u čvrstim tijelima, kao i njihove interakcije sa elektromagnetskim zračenjem. Da bi postigla takav uspjeh kvantna mehanika se morala razviti na konceptima koji su potpuno različiti od onih u klasičnoj fizici. To je izmijenilo naš pogled na prirodu svijeta oko nas.

Na kraju devetnaestog vijeka nauka je *materijalne čestice i zračenja* opisivala potpuno različitim zakonima. Kretanje materijalnih tijela opisivano je zakonima *Newtonove mehanike*, dok su osobine elektromagnetskog zračenja uspješno objašnjene *Maxwellovom teorijom elektromagnetskog polja* (J. C. Maxwell (Maksvel), 1831.-1878.). Maxwellova teorija, potvrđena Hertzovim eksperimentima (Heinrich Rudolf Hertz (Herc), 1857.-1894.) je omogućila jedinstvenu interpretaciju niza pojava za koje se ranije smatralo da pripadaju različitim oblastima: elektricitetu, magnetizmu i optici. *Interakcija zračenja i materije* bila je dobro objašnjena *Lorentzovom silom* (H. Lorentz (Lorenc), 1853.-1927.). Taj skup zakona je na zadovoljavajući način objašnjavao sva dotadašnja eksperimentalna zapažanja.

Početkom dvadesetog vijeka dolazi do revolucionarnog preokreta u fizici. Nezavisno jedna od druge pojavile su se relativistička fizika i kvantna fizika. Klasični zakoni prestaju da važe za materijalna tijela koja se kreću vrlo velikim brzinama, uporedljivim sa brzinom svjetlosti (relativistička oblast). Klasični zakoni su također podbacili na atomskoj i subatomskoj skali (kvantna

oblast). Važno je zapaziti da se na klasičnu fiziku, u obadva ta slučaja, može gledati kao na aproksimaciju novih teorija, aproksimaciju koja je ispravna za većinu fenomena sa kojima se susrećemo u svakodnevnom životu. Npr., Newtonova mehanika omogućava da se korektno predvidi kretanje čvrstog tijela ako je to kretanje nerelativističko (tj. ako mu je brzina mnogo manja od brzine svjetlosti u vakuumu) i ako je to tijelo makroskopsko (tj. ako su mu dimenzijske mnogo veće od dimenzije atoma). Bez obzira na to, sa fundamentalne tačke gledišta, kvantna teorija je neophodna. To je jedina teorija koja omogućava da se shvati zašto čvrsta tijela uopšte postoje, kao i da odredi vrijednosti makroskopskih parametara (gustoće, specifične toplove, elastičnosti, itd.) koje su im pridružene. Pored toga, bitno je da je kvantna teorija dovela do ujedinjenja dvaju fundamentalnih fizikalnih koncepata: čestica i talasa. O tom tzv. čestično-talasnom odnosno korpuskularno-valnom dualizmu biće kasnije više riječi.

Glavni cilj ovoga kursa Kvantna mehanika I je da se upoznamo sa osnovama nerelativističke kvantne mehanike. U okviru predmeta Kvantna mehanika II posebnu pažnju posvetit ćemo rješavanju konkretnih problema i primjenama kvantne mehanike. Zadnji dio toga kursa bit će uvod u relativističku kvantnu mehaniku.

U ovom uvodnom poglavlju prvo ćemo detaljno analizirati zakone zračenja čije je objašnjenje predstavljalo prvi uspjeh kvantne teorije. Zatim ćemo navesti niz eksperimenata koji su uspješno objašnjeni tek nakon što je prihvaćena neophodnost kvantiziranja fizikalnih veličina. Konačno, u zadnjem odjeljku ćemo posvetiti pažnju čestično-talasnom dualizmu i principu komplementarnosti. Izlaganje u ovom poglavlju je nešto obimnije i može poslužiti kao dopuna kursa atomske fizike.

1.1 Zakoni zračenja

Sa istorijske tačke gledišta, početak razvoja kvantne teorije je povezan sa zakonima zračenja. Krajem devetnaestog vijeka zakon zračenja crnog tijela, koji daje zavisnost gustoće energije od frekvencije zračenja i temperature, bio je opisan sa dvije odvojene, međusobno kontradiktorne, formule klasične fizike. Rayleigh-Jeansov (Lord Rayleigh (Rejli), 1824.-1919., i J. Jeans (Džins), 1877.-1946.) zakon zračenja se slagao sa eksperimentima za velike talasne dužine (tj. niske frekvencije), dok je Wienov (W. Wien (Vin), 1864.-1928.) zakon bio ispravan za kratkotalasno zračenje. Tu kontradikciju je razriješio Planck (M. Planck (Plank), 1858.-1947.), izvevši formulu koja vrijedi za sve talasne dužine i sadrži u sebi (kao granične slučajevе) obadva pomenuta zakona. Pri tome je uveo novu konstantu h , koja je kasnije naz-

vana po njemu. 14. decembra 1900. godine Max Planck je predstavio svoje rezultate na sastanku Njemačkog fizičkog društva u Berlinu. Taj dan se smatra “rođendanom” kvantne teorije.¹ Zato ćemo u ovom poglavlju prvo razmotriti zakone zračenja crnog tijela.

1.1.1 Gustoća energije elektromagnetskog polja

Elektromagnetno polje ćemo opisivati klasičnim jednačinama i pokazat ćemo da se hipoteza kvanta svjetlosti može uvesti u klasičnu teoriju koristeći jedan dopunski uslov za izračunavanje energije elektromagnetskog polja. Izvest ćemo Planckovu formulu koja opisuje spektralnu raspodjelu energije elektromagnetskog zračenja unutar rezonatora u termodinamičkoj ravnoteži pri temperaturi T . Takvo zračenje se može nazvati zračenjem crnog tijela. Pod pojmom *rezonatora* ovdje podrazumijevamo homogenu i izotropnu dielektričnu sredinu koja je zatvorena u nekoj zapremini V i koja neprekidno emituje i apsorbuje elektromagnetno zračenje. Prema klasičnoj teoriji, gustoća energije elektromagnetskog polja, opisanog jačinama električnog polja \mathbf{E} i magnetnog polja \mathbf{H} , određena je formulom:

$$w = \frac{1}{2} (\varepsilon \mathbf{E}^2 + \mu \mathbf{H}^2) = \int_0^\infty w_\nu d\nu, \quad (1.1)$$

gdje je $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$, $\mu = \mu_0 \mu_r$, ε_r relativna (dielektrična) permitivnost, ε_0 permitivnost za vakuum, μ_r relativna (magnetna) permeabilnost, a μ_0 (magnetna) permeabilnost za vakuum. Te veličine su povezane sa brzinom elektromagnetskog talasa u razmatranoj sredini v formulom $\varepsilon \mu v^2 = 1$ (za vakuum je $\varepsilon_0 \mu_0 c^2 = 1$).² Drugi dio formule (1.1) daje vezu gustoće energije w i spektralne raspodjele gustoće energije $w_\nu = \partial w / \partial \nu$. Može se pokazati da je spektralna raspodjela gustoće energije zračenja w_ν univerzalna funkcija koja ne zavisi ni od oblika rezonatora, ni od prirode dielektrične sredine, već samo od frekvencije ν i temperature T : $w_\nu = w_\nu(\nu, T)$ (to je prvi Kirchhoffov (K. G. Kirchhoff (Kirhof), 1824.-1887.) zakon). Funkcionalnu zavisnost

¹O istorijskom razvoju kvantne teorije pogledati npr. referencu: *More Things in Heaven and Earth. A celebration of physics at the millennium*, editor B. Bederson, Springer and The American Physical Society, New York, 1999.

²Vrijednosti fundamentalnih fizičkih konstanti mogu se naći npr. u: E. R. Cohen, B. N. Taylor, *The 1986 Adjustment of the Fundamental Physical Constants*, report of the CODATA Task Group on Fundamental Constants, CODATA Bulletin 63, Pergamon, Elmsdorf, New York, 1986.; Rev. Mod. Phys. 57, 1121 (1987). Za gore navedene slučajeve one iznose: $\varepsilon_0 = 8,854\,187\,817 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ H m}^{-1} = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ N A}^{-2}$, $c = 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$.

$w_\nu = w_\nu(\nu, T)$ ćemo odrediti u tri koraka. Prvo ćemo izvesti izraz za zavisnost polja u rezonatoru od prostorne koordinate, a zatim ćemo odrediti broj različitih *modova polja*.³ Treći korak će biti da izračunamo energiju moda pri temperaturi T .

1.1.2 Koordinatna zavisnost polja u rezonatoru

Iz Maxwellovih jednačina slijedi da vektor jačine električnog polja \mathbf{E} zadovoljava talasnu jednačinu:

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}, \quad (1.2)$$

gdje je ∇^2 Laplaceov (Pierre Simon de Laplace (Laplas), 1749.-1827.) operator, a v brzina prostiranja talasa. Rješenje jednačine (1.2) se može dobiti razdvajanjem prostornih i vremenskih promjenljivih:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = f(t)\mathbf{u}(\mathbf{r}), \quad (1.3)$$

gdje $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ i $f(t)$ zadovoljavaju jednačine:

$$\nabla^2 \mathbf{u} = -k^2 \mathbf{u}, \quad (1.4a)$$

$$\frac{d^2 f}{dt^2} = -\omega^2 f, \quad (1.4b)$$

k je konstanta, a $\omega = vk$. Rješenje jednačine (1.4b) je:

$$f(t) = f_0 \sin(\omega t + \varphi), \quad (1.5)$$

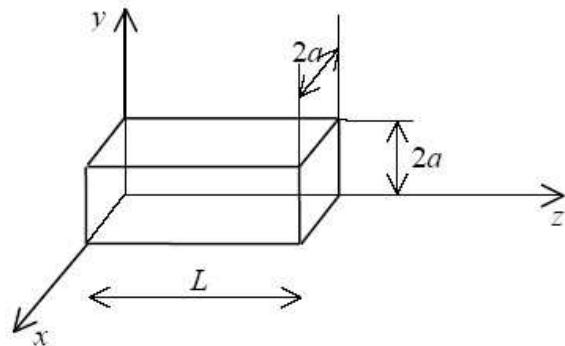
gdje su f_0 i φ proizvoljne konstantne veličine.

Prepostavimo da su zidovi rezonatora (pravougaonog oblika, slika 1.1) idealno propusni, tako da je tangencijalna komponenta polja jednaka nuli na granicama rezonatora (matematički se to izražava jednačinom $\mathbf{E} \times \hat{\mathbf{n}} = \mathbf{0}$, gdje je $\hat{\mathbf{n}}$ normala na površinu rezonatora). Uz takav granični uslov, rješenje Helmholtzove (H. Helmholtz (Helmholc), 1821.-1894.) jednačine (1.4a) je oblika:

$$\begin{aligned} u_x &= e_x \cos k_1 x \sin k_2 y \sin k_3 z, \\ u_y &= e_y \sin k_1 x \cos k_2 y \sin k_3 z, \\ u_z &= e_z \sin k_1 x \sin k_2 y \cos k_3 z, \end{aligned} \quad (1.6)$$

pri čemu, ako želimo da granični uslov bude zadovoljen na svim vanjskim površinama rezonatora, moraju biti ispunjeni uslovi:

³Jedan mod je tačno određeno rješenje talasne jednačine za vektor jačine električnog polja, ili, pojednostavljeno rečeno, mod je zrak svjetlosti tačno određenog smjera i polarizacije.



Slika 1.1: Pravougaoni rezonator.

$$k_1 = \frac{n_1\pi}{2a}, \quad k_2 = \frac{n_2\pi}{2a}, \quad k_3 = \frac{n_3\pi}{L}. \quad (1.7)$$

Konkretno, za $x = 2a$ je $\sin k_1 x = 0$, pa je $u_y = u_z = 0$, što se i zahtjeva (graničnim uslovom). Veličine k_1 , k_2 i k_3 su komponente valnog vektora \mathbf{k} koji određuje smjer prostiranja elektromagnetskog talasa, pri čemu je $k^2 = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2$, čime je određena i frekvencija $\nu = kv/(2\pi)$. Pozitivni cijeli brojevi n_1 , n_2 i n_3 predstavljaju broj čvorova moda stajećeg talasa u smjeru x , y i z , respektivno. Maxwellova jednačina $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ vodi na uslov ortogonalnosti polja \mathbf{E} i valnog vektora \mathbf{k} :

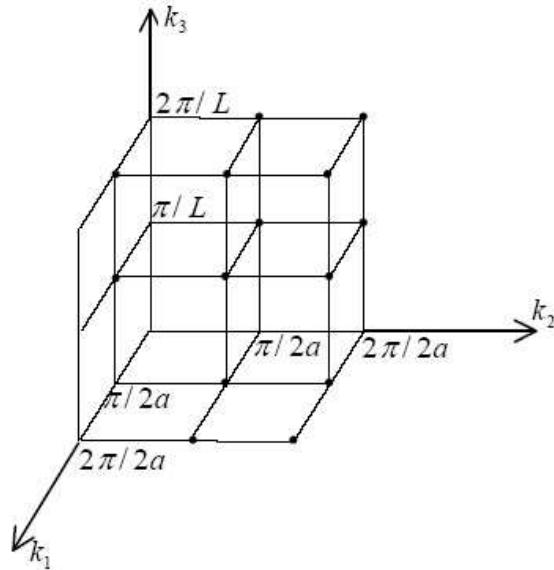
$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{e} = 0. \quad (1.8)$$

Uslov (1.8) ukazuje na to da vektor \mathbf{e} leži u ravni okomitoj na \mathbf{k} . U toj ravni za izbor smjera vektora \mathbf{e} ostaju samo dva stepena slobode, što odgovara dvjema komponentama *polarizacije polja*. To znači da svaki skup brojeva (n_1, n_2, n_3) određuje dva moda polja koji se razlikuju po polarizaciji. Svako pobuđenje elektromagnetskog polja se može predstaviti u obliku sume takvih modova polja.

1.1.3 Broj različitih modova polja

Izračunajmo broj modova u rezonatoru $N(\nu)$ koji imaju frekvenciju u intervalu $[0, \nu]$, odnosno amplitudu valnog vektora k u intervalu $[0, 2\pi\nu/v]$. Na osnovu jednačine (1.7), očito je da su u sistemu koordinata k_1, k_2, k_3 moguće vrijednosti \mathbf{k} date vektorima koji spajaju koordinatni početak sa čvornim tačkama trodimenzionalne rešetke prikazane na slici 1.2. Pošto su veličine k_1 , k_2 i k_3 pozitivne, to uzimamo samo tačke koje leže u pozitivnom oktantu. Broj takvih tačaka je jednak jednoj osmini odnosa zapremine sfere sa centrom u koordinatnom početku, radijusa $2\pi\nu/v$, i zapremine elementarne

ćelije dimenzija $\pi/(2a)$, $\pi/(2a)$ i π/L . Uzimajući u obzir da svakom vektoru \mathbf{k} odgovaraju dva moda polja (tj. dva nezavisna smjera polarizacije), dobijamo:



Slika 1.2: Dozvoljene vrijednosti vektora \mathbf{k} za rezonator u obliku pravougaonika.

$$N(\nu) = 2 \frac{\frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2\pi\nu}{v} \right)^3}{\frac{\pi}{2a} \frac{\pi}{2a} \frac{\pi}{L}} = \frac{8\pi\nu^3}{3v^3} V, \quad (1.9)$$

gdje je V zapremina rezonatora. Dakle, traženi broj modova u jedinici zapremine i u jediničnom frekventnom intervalu je:

$$\frac{1}{V} \frac{dN(\nu)}{d\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{v^3}. \quad (1.10)$$

1.1.4 Srednja energija moda u rezonatoru. Rayleigh-Jeansova i Wienova formula

Predimo sada na drugi korak našeg problema nalaženja zavisnosti $w_\nu(\nu, T)$ i izračunajmo srednju energiju proizvoljnog moda u rezonatoru na temperaturi T . U skladu sa Boltzmannovom (L. Boltzmann (Boltzman), 1844.-1906.) statistikom, vjerovatnoća da energija datog moda rezonatora poprima vrijednosti između E i $E + dE$ je proporcionalna $e^{-E/(k_B T)} dE$, tako da je srednja

energija moda:

$$\bar{E} = \frac{\int_0^\infty E e^{-\frac{E}{k_B T}} dE}{\int_0^\infty e^{-\frac{E}{k_B T}} dE} = k_B T. \quad (1.11)$$

Tražena spektralna gustoća energije je jednaka proizvodu broja modova u jedinici zapremine i u jediničnom frekventnom intervalu, (1.10), i srednje energije moda \bar{E} , (1.11):

$$w_\nu = \frac{1}{V} \frac{dN(\nu)}{d\nu} \bar{E} = \frac{8\pi\nu^2}{v^3} k_B T. \quad (1.12)$$

To je *Rayleigh-Jeansova formula*. Ta formula je u suprotnosti sa eksperimentalnim rezultatima za visoke frekvencije, dok je za niske frekvencije ν slaganje teorije i eksperimenta vrlo dobro. Lako se može pokazati da formula (1.12) nije ispravna ako se pokuša izračunati integralna gustoća energije $w = \int_0^\infty w_\nu d\nu$. Dobija se da $w \rightarrow \infty$, što znači da klasična teorija ne daje ispravne rezultate za zračenje crnog tijela. Divergencija gustoće energije w je poznata pod nazivom *ultraljubičasta katastrofa*.

Drugačiji zakon zračenja je izveo Wien. Pretpostavljajući da je raspodjela gustoće energije po frekvencijama analogna Maxwellovoj raspodjeli molekula gasa po brzinama, izveo je slijedeći rezultat:

$$w_\nu = C_1 \nu^3 e^{-C_2 \nu/T}, \quad (1.13)$$

gdje su C_1 i C_2 konstante. *Wienov zakon zračenja* (1.13) se slaže sa eksperimentima samo u oblasti malih talasnih dužina.

1.1.5 Planckova formula

Probleme do kojih je dovela primjena klasične teorije na zračenje crnog tijela riješio je Planck uvodeći *hipotezu o kvantima svjetlosti*. Prema toj hipotezi *energija datog moda rezonatora ne može da poprima proizvoljne vrijednosti od 0 do ∞* , kao što je to pretpostavljeno pri izvođenju formule (1.11), već samo "porcije" energije oblika $E = nh\nu$, gdje je n pozitivan cijeli broj, a h neka konstanta (kasnije nazvana Planckova konstanta). Tada u (1.11) umjesto integrala imamo sume i vrijedi:

$$\bar{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-\frac{nh\nu}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{nh\nu}{k_B T}}} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}. \quad (1.14)$$

Ta formula se suštinski razlikuje od (1.11). U graničnom slučaju kada $h \rightarrow 0$, formula (1.14) se svodi na (1.11) (upravo limes $h \rightarrow 0$ odgovara prelazu sa kvantne na klasičnu teoriju). Tražena *Planckova formula*, na osnovu (1.10) i (1.14), je:

$$w_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{v^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}. \quad (1.15)$$

Ta formula je u saglasnosti sa eksperimentima. Za visoke frekvencije ona se svodi na Wienovu formulu (1.13). Na osnovu Planckove formule (1.15), za totalnu gustoću energije zračenja crnog tijela dobija se:

$$\begin{aligned} w &= \int_0^\infty w_\nu d\nu = \frac{8\pi h}{v^3} \int_0^\infty \frac{\nu^3 d\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} = \frac{8\pi k_B^4 T^4}{v^3 h^3} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \\ w &= an^3 T^4, \quad a = \frac{8\pi^5 k_B^4}{15 c^3 h^3} = 7,565\,91(52) \cdot 10^{-16} \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-4}, \end{aligned} \quad (1.16)$$

gdje je korištena formula $\int_0^\infty \frac{xdx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}$, a n je indeks prelamanja sredine ($v = c/n$).

1.1.6 Einsteinovo izvođenje Planckove formule

U ovom odjeljku ćemo predstaviti nešto drugačije izvođenje Planckove formule koje potiče od Einsteina (A. Einstein (Ajnštajn), 1879.-1955.) i koje se ne bazira na izračunavanju broja modova i njihove srednje energije. Pretpostavimo da imamo rezonator – crno tijelo, čiji se zidovi održavaju na konstantnoj temperaturi T . Kada je sistem u termodinamičkoj ravnoteži sredina unutar rezonatora se nalazi u polju zračenja čija je spektralna gustoća energije w_ν . U sredini se odvijaju procesi spontane emisije, stimulisane emisije i apsorpcije. Pošto se cijeli sistem nalazi u stanju termodinamičke ravnoteže, broj prelaza sa nižeg energetskog nivoa m na viši nivo n mora biti jednak broju prelaza sa nivoa n na nivo m . Označimo vjerovatnoću apsorpcije sa W_{mn} , vjerovatnoću stimulisane emisije sa W_{nm} i vjerovatnoću spontane emisije sa A_{nm} . Uvedimo konstantne koeficijente B_{mn} i B_{nm} (tzv. Einsteinove koeficijente B):

$$W_{mn} = B_{mn} w_{\nu_0}, \quad (1.17a)$$

$$W_{nm} = B_{nm} w_{\nu_0}, \quad (1.17b)$$

gdje je $\nu_0 \equiv \nu_{nm} = (E_n - E_m) / h$ (E_n i E_m su energije nivoa n i m , respektivno). Neka su N_n i N_m ravnotežne naseljenosti nivoa n i m .⁴ Tada uslov termodinamičke ravnoteže glasi:

$$A_{nm}N_n + B_{nm}w_{\nu_0}N_n = B_{mn}w_{\nu_0}N_m. \quad (1.18)$$

Prema Boltzmannovoj statistici je:

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{g_n}{g_m} \exp\left(-\frac{h\nu_0}{k_B T}\right), \quad (1.19)$$

gdje su g_n i g_m statističke težine ili stepeni degeneracije datih nivoa, tj. brojevi kvantnih stanja sa istim energijama. Tada se, na osnovu (1.18), dobija:

$$w_{\nu_0} = \frac{g_n A_{nm}}{g_m B_{mn} e^{\frac{h\nu_0}{k_B T}} - g_n B_{nm}}. \quad (1.20)$$

Poređenjem (1.20) sa Planckovom formulom (1.15), zaključujemo da je:

$$g_m B_{mn} = g_n B_{nm}, \quad (1.21a)$$

$$A_{nm} = B_{nm} \frac{8\pi\nu_0^2}{v^3} h\nu_0 = B_{nm} 8\pi h \left(\frac{\nu_0}{v}\right)^3. \quad (1.21b)$$

Jednačina (1.21a) pokazuje da su vjerovatnoća apsorpcije i vjerovatnoća stimulisane emisije, uzrokovane zračenjem crnog tijela, u slučaju jednake degeneracije nivoa ($g_n = g_m$), jednake. Jednačina (1.21b) omogućava da se izračuna koeficijent A_{nm} na osnovu poznatog koeficijenta B_{nm} . Koeficijent B_{nm} se može izračunati primjenom formalizma kvantne mehanike.

1.1.7 Ekscitacija. Stefan-Boltzmannov zakon i Wienov zakon pomjeranja

Često se umjesto zapreminske gustoće w koristi veličina M – ekscitancija (emitancija ili emisiona sposobnost). Ekscitancija je gustoća izlaznog fluksa zračenja i povezana je sa gustoćom energije w formulom (vidjeti zadatak 1.1.1):

$$M = \frac{v}{4} w, \quad (1.22)$$

⁴Naseljenost ili populacija nivoa je broj atoma u jedinici zapremine koji se “nalazi” na tom nivou.

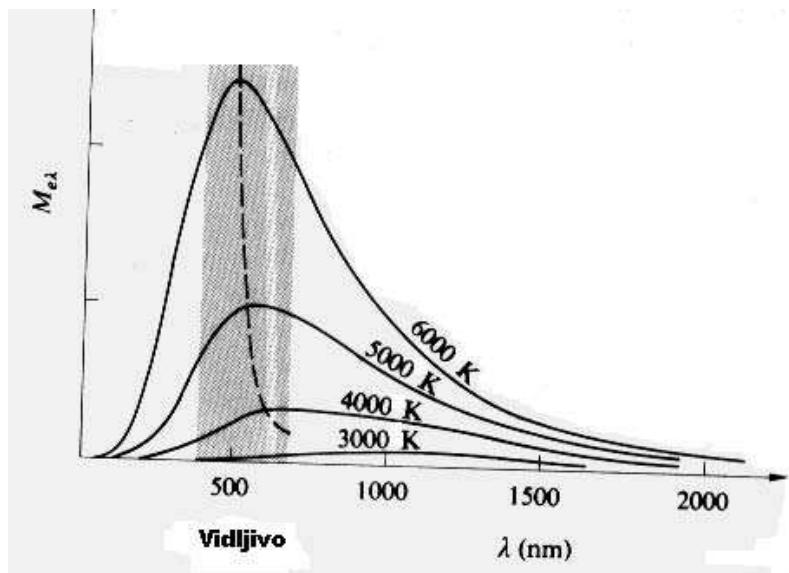
tako da je:

$$M = n^2 \sigma T^4, \quad \sigma = \frac{ac}{4} = 5,670\,51(19) \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}. \quad (1.23)$$

Ova relacija predstavlja poznati Stefan-Boltzmannov zakon (J. Stefan (Štefan), 1835.-1893.), a konstanta σ se naziva Stefan-Boltzmannova konstanta.

Eksperimentalno se obično mjeri spektralna ekscitancija $M_\lambda \equiv \partial M / \partial \lambda = -v M_\nu / \lambda^2$ kao funkcija talasne dužine (vidjeti zadatke 1.1.1 i 1.1.2). Na slici 1.3 je prikazana zavisnost M_λ od λ za četiri različite vrijednosti temperature T . Vidimo da M_λ ima maksimum pri određenoj vrijednosti λ . Interesuje nas kakva je raspodjela gustoće energije po talasnim dužinama $w_\lambda = 4M_\lambda/v$ i kako talasna dužina λ_{\max} , koja odgovara maksimalnoj vrijednosti w_λ , zavisi od temperature. Rezultat te analize (vidjeti zadatak 1.1.2) je Wienov zakon pomjeranja:

$$\lambda_{\max} = \frac{1}{n} \frac{b}{T}, \quad b = 2,897\,756(24) \cdot 10^{-3} \text{ m K}. \quad (1.24)$$



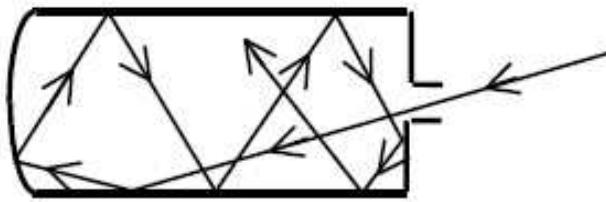
Slika 1.3: Ekscitancija M_λ zračenja crnog tijela kao funkcija talasne dužine za različite temperature. Na slici je označena vidljiva oblast spektra (osjenčeni dio) i kriva koja odgovara Wienovom zakonu pomjeranja (isprekidana linija).

Uvedimo apsorpcionu spektralnu sposobnost ili koeficijent apsorpcije zračenja frekvencije ν , A_ν , kao odnos energije koju apsorbuje element površine tijela u jednoj sekundi u frekventnom intervalu $(\nu, \nu + d\nu)$ i totalne energije

koja pada u jednoj sekundi na taj element površine u istom frekventnom intervalu. Prema drugom Kirchhoffovom zakonu odnos emisione i apsorpcione spektralne sposobnosti proizvoljnog tijela u ravnotežnom stanju je:

$$\frac{M_\nu}{A_\nu} = \frac{v}{4} w_\nu. \quad (1.25)$$

Za apsolutno crno tijelo (npr. šuplji rezonator sa malim otvorom, slika 1.4; zračenje koje uđe u rezonator u potpunosti se apsorbuje) je $A_\nu = 1$. Za stvarna tijela je $A_\nu < 1$, tako da je i integralna emisiona sposobnost takvih tijela manja. Konkretno, ona je $M' = \kappa M$, gdje je M dato sa (1.23) i odnosi se na apsolutno crno tijelo, a κ je koeficijent koji zavisi od vrste materijala i temperature (npr. za volfram pri $T = 1500$ K je $\kappa = 0,15$).



Slika 1.4: Model apsolutno crnog tijela.

1.1.8 Specifična toplota sistema materijalnih čestica

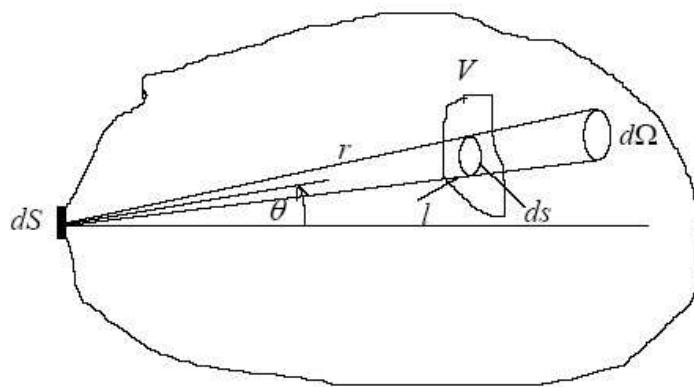
Atomi u čvrstima tijelima osciluju oko ravnotežnog položaja. To oscilovanje se može opisati sistemom nezavisnih harmonijskih oscilatora. Gustoća energije takvog sistema oscilatora se može opisati analogno kao gustoća energije elektromagnetskog polja. Pri tome, pored transverzalnih, treba uzeti u obzir i longitudinalne talase, tj. umjesto faktora 2 u formuli (1.9) treba uzeti faktor 3. Dakle, i klasični (1.12) i kvantni (1.15) rezultat za spektralnu gustoću energije pri određenoj temperaturi T treba pomnožiti sa faktorom $3/2$. Specifična toplota sistema čestica u čvrstima tijelima se definiše (pri konstantnoj zapremini V) kao $c_V = (\partial w / \partial T)_V$. Klasični rezultat [vidjeti jednačinu (1.12)] vodi na to da c_V ne zavisi od temperature. Međutim, eksperimentalni rezultati za specifičnu toplotu pokazuju da $c_V \rightarrow 0$ kada $T \rightarrow 0$, i to, pri niskim temperaturama, kao T^3 . Dakle, i u ovom slučaju se klasična teorija ne slaže sa eksperimentima. Međutim, Planckova formula [vidjeti jednačine (1.15) i (1.16)] je u saglasnosti sa eksperimentima. Planckova hipoteza o kvantima je razjasnila i ovaj problem klasične teorije.

Napomenimo da je teoriju specifične toplice sistema čestica u čvrstim tijelima formulisao Debye (P. J. W. Debye (Debaj), 1884.-1966.) 1912. godine. Nešto ranije, 1907. godine, Einstein je dao sličnu, ali vrlo pojednostavljenu teoriju.

1.1.9 Zadaci

Zadatak 1.1.1. Naći vezu između gustoće energije w u rezonatoru crnoga tijela i gustoće izlaznog fluksa zračenja koje emituju zidovi crnoga tijela.

Rješenje: Izračunajmo, koristeći se prikazanom slikom, gustoću emisije u



nekoj zapremini V unutar rezonatora, koja je uzrokovana zračenjem zidova rezonatora. Vrh konusa prostornog ugla $d\Omega$ se nalazi na elementu površine dS koji se od zapremine V nalazi na rastojanju r . Presjek toga konusa sa zapreminom V formira cilindar poprečnog presjeka ds i dužine l . U skladu sa Lambertovim (J. H. Lambert, 1728.-1777.) kosinusnim zakonom, snaga koju emituje element površine dS u prostorni ugao $d\Omega$ u smjeru određenom uglom θ u odnosu na normalu na tu površinu je $d\varepsilon/dt = B \cos \theta dS d\Omega$, gdje je B sjaj površine crnog tijela (za fizikalnu veličinu sjaj koriste se i nazivi površinska gustoća zračenja ili radijancija i oznaka L). Energija u zapremini V je $\varepsilon = \frac{l}{v} B \cos \theta dS \frac{ds}{r^2}$, gdje je l/v vrijeme prolaska zračenja kroz zapreminu V , a $d\Omega = ds/r^2$. Ukupni doprinos od elementa površine dS u zapremini V se nalazi integriranjem po svim prostornim uglovima koji polaze od elementa dS , što daje $\int l ds = V$. Nadalje, treba integrirati energiju zračenja po cijeloj površini crnoga tijela. Tako za gustoću energije u zapremini V dobijamo: $w = \frac{E}{V} = \frac{B}{v} \int \frac{\cos \theta}{r^2} dS$. Veličina $\cos \theta \frac{dS}{r^2}$ je jednaka prostornom uglu $d\Omega'$ pod kojim se površina dS vidi iz bilo koje tačke zapremine V (za koju se pretpostavlja

da je vrlo mala), tako da je:

$$w = \frac{B}{v} \int d\Omega' = 4\pi B/v. \quad (1.26)$$

S druge strane, gustoća izlaznog (emitovanog) fluksa zračenja (za ovu veličinu se koriste i nazivi ekscitacija, emitacija ili emisiona sposobnost) je (proračun se vrši u sfernim koordinatama):

$$M = \int_{\theta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} B \cos \theta d\Omega = B \int_{\theta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi = B \cdot 2\pi \cdot \frac{1}{2} = \pi B. \quad (1.27)$$

Poređenjem (1.26) i (1.27) konačno se dobija:

$$w = \frac{4}{v} M. \quad (1.28)$$

Analogno, za spektralnu gustoću zračenja vrijedi: $w_\nu = 4M_\nu/v$, tako da je, na osnovu Planckove formule (1.15), spektralna gustoća izlaznog fluksa zračenja koje emituje površina crnog tijela data sa: $M_\nu = 2\pi \left(\frac{\nu}{v}\right)^2 \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}$.

Zadatak 1.1.2. Izvesti Wienov zakon pomjeranja polazeći od Planckove formule.

Rješenje: Planckova formula glasi: $w_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{v^3} \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}$. Wienov zakon daje vezu λ_{\max} i T . Na osnovu toga zaključujemo da nam treba izraz za spektralnu rasподjelu energije po talasnim dužinama w_λ . Vrijedi: $dw = w_\lambda d\lambda = \frac{\partial w}{\partial \lambda} d\lambda = \frac{\partial w}{\partial \nu} d\nu = w_\nu d\nu$, $\nu = \frac{c}{\lambda}$, $\frac{d\nu}{d\lambda} = -\frac{c}{\lambda^2}$, $w_\lambda = w_\nu \frac{d\nu}{d\lambda} = -\frac{c}{\lambda^2} w_\nu = -\frac{8\pi h c}{\lambda^5 [\exp(hc/(\lambda k_B T)) - 1]}$. Maksimum se dobija iz uslova: $\partial w_\lambda / \partial \lambda = 0$. Ako označimo $x = \frac{vh}{\lambda k_B T}$, uslov $\partial w_\lambda / \partial \lambda = 0$ vodi na slijedeću transcendentalnu jednačinu za x : $5 = xe^x / (e^x - 1)$, čije numeričko rješenje je $x = 4,965\,114\,23$, odakle slijedi da je $\lambda_{\max} T = \frac{hv}{k_B x} = \frac{1}{n} b$, gdje je $b = 2898 \mu\text{m K}$ konstanta Wienovog zakona pomjeranja. Primjer: $T_{\text{Sunca}} = 6000 \text{ K} \Rightarrow \lambda_{\max} = 0,483 \mu\text{m}$.

Zadatak 1.1.3. Napisati Rayleigh-Jeansovu i Planckovu formulu za spektralnu gustoću raspodjele energije (u vakuumu) po ugaonoj frekvenciji ω .

Rješenje: $w_\omega = \frac{\partial w}{\partial \omega} = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial w}{\partial \nu} = \frac{1}{2\pi} w_\nu \Rightarrow w_\omega^{\text{RJ}} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T$, $w_\omega^{\text{P}} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$.

Zadatak 1.1.4. Zanemarujući gubitke toplote na toploprovodnost izračunati snagu električne struje P koja je neophodna za zagrijavanje niti prečnika $D = 0,5 \text{ mm}$ i dužine $l = 10 \text{ cm}$ do temperature $T = 3000 \text{ K}$. Smatrati

da nit emituje zračenje kao apsolutno crno tijelo.

Rješenje: $M = P/S = \sigma T^4$, gdje je P tražena snaga, a S površina niti: $S = D\pi l + 2 \cdot \frac{D^2\pi}{4} = D\pi \left(l + \frac{D}{2}\right)$. $P = S\sigma T^4 = D\pi \left(l + \frac{D}{2}\right) \sigma T^4 = 723 \text{ W}$.

Zadatak 1.1.5. Za otkrivanje tumora koriste se uređaji (termografi) koji registruju male promjene temperature ljudske kože. Koža iznad tumora je toplija tako da je toplotno zračenje tog dijela kože intenzivnije, što se prikazuje različitim bojama na termogramu. Kolika je procentualna razlika energije toplotnog zračenja kože na temperaturama 35° C i 36° C ?

Rješenje: Stefan-Boltzmannov zakon za temperature $T_1 = (273, 15 + 35) \text{ K} = 308, 15 \text{ K}$ i $T_2 = 309, 15 \text{ K}$ glasi $E_1 = \varepsilon \sigma T_1^4$ i $E_2 = \varepsilon \sigma T_2^4$, gdje je emisivnost kože ε ista za obadvije temperature. Tražena procentualna razlika energija je: $(E_2 - E_1)/E_1 = (T_2^4 - T_1^4)/T_1^4 = 1,3\%$.

Zadatak 1.1.6. Oko je najosjetljivije na svjetlost talasne dužine 555 nm . Koliku temperaturu mora imati apsolutno crno tijelo da bi mu maksimum zračenja bio upravo na toj talasnoj dužini?

Rješenje: $T = b/\lambda_{\max} = 5221 \text{ K}$.

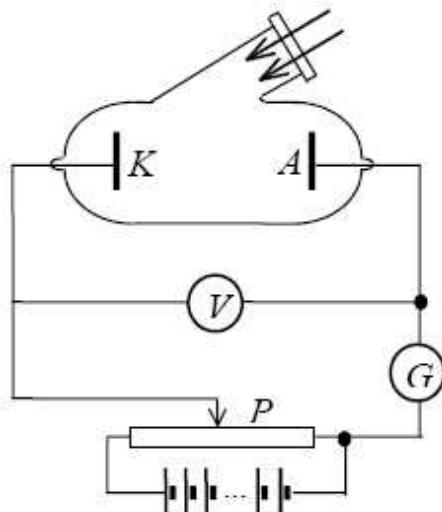
1.2 Kvantiziranje fizikalnih veličina

U prethodnom odjeljku smo, pomoću Planckove hipoteze o svjetlosnim kvantima, uspješno objasnili zakone zračenja crnog tijela. Osim zračenja crnog tijela postoje i druge pojave koje se mogu objasniti samo uvođenjem *kvanata elektromagnetskog zračenja*, odnosno *fotona*. U ovom odjeljku ćemo analizirati neke od tih pojava. Napomenimo da ćemo u trećem odjeljku više pažnje posvetiti čestično-talasnom dualizmu po kojem se elektromagnetni talasi opisuju ili pomoću fotona ili pomoću elektromagnetnih talasa, u zavisnosti od vrste problema koji se razmatra.

1.2.1 Fotoelektrični efekat

Druga pojava koja se nije mogla rastumačiti primjenom zakona klasične fizike je fotoelektrični efekat. To je proces emisije elektrona sa površine tijela (npr. metala) kada se ono obasja elektromagnetskim zračenjem. Ironija je da je tu pojavu otkrio upravo Hertz, čovjek koji je svojim otkrićem elektromagnetnih talasa omogućio da se učvrsti klasična fizika. On je, uporedo sa radom na svom glavnom otkriću, 1887. godine zapazio da je preskakanje električne varnice između kuglica od cinka znatno olakšano ako se jedna od njih os-

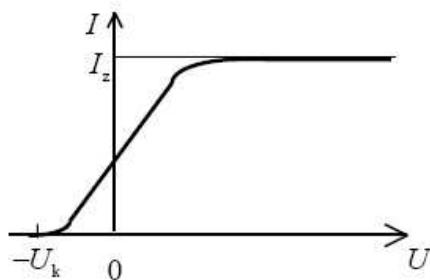
vijetli ultraljubičastom svjetlošću. 1888. godine engleski fizičar Hallwachs (W. Hallwachs (Halvaks), 1859.-1922.) je otkrio da se pri toj pojavi iz metala emituju neke negativno nanelektrisane čestice. To zapaža i profesor Moskovskog univerziteta Stoljetov (Aleksandr Grigorevič Stoljetov, 1839.-1896.). U svojim istraživanjima u periodu od 1888. do 1890. godine on konstruiše prvi uređaj za mjerjenje fotoelektrične struje. 1899. godine Thomson (Joseph John Thomson (Tomson), 1856.-1940.) i Lenard (Philipp Lenard, 1862.-1947.) su pokazali, mijereći odnos nanelektrisanja i mase tih čestica, da su te negativno nanelektrisane čestice elektroni. U periodu od 1899. do 1902. godine Lenard objavljuje svoje rade u kojima je sadržan opis osnovnih karakteristika pojave fotoelektričnog efekta. Objasnimo te rezultate pomoću šeme eksperimentalnog uređaja za mjerjenje fotoelektričnog efekta koja je predstavljena na slici 1.5. Katoda K i anoda A su smještene u stak-



Slika 1.5: Šema eksperimentalnog uređaja za mjerjenje fotoelektričnog efekta.

leni balon iz kojeg je izvučen vazduh. Katoda se osvjetljava svjetlošću kroz prozor od kvarcnog stakla koje, za razliku od običnog stakla, propušta i ultraljubičaste zrake. Elektroni, koji su uslijed fotoelektričnog efekta izbačeni iz katode, kreću se pod djelovanjem električnog polja prema anodi. Uslijed toga, u kolu uređaja teče fotostruja koja se mjeri galvanometrom G . Napon između katode i anode mjeri se voltmetrom V , a može se mijenjati pomoću potenciometra P . Zavisnost fotostruje od napona, pri konstantnoj vrijednosti intenziteta svjetlosti kojom se osvjetljava katoda, predstavljena je na slici 1.6. Sa slike se vidi da pri nekoj vrijednosti napona fotostruja dostiže zasićenje ($I = I_z$) i svi elektroni koji su izbačeni iz katode padaju na anodu.

Nagib krive na slici ukazuje na to da elektroni izlijeću iz katode sa različitim brzinama. Vidimo da fotostruja postoji i kada je napon $U = 0$. Toj struji doprinose svi elektroni koji posjeduju brzine dovoljne da stignu do anode i bez pomoći napona U . Kada je napon negativan, on djeluje usporavajuće na elektrone. Povećanjem tog usporavajućeg napona, moguće je u potpunosti zaustaviti tok struje. Napon pri kojem je struja jednaka nuli naziva se *napon kočenja* U_k . Pri tom naponu, čak ni elektroni koji se kreću maksimalnom brzinom v_m ne mogu da stignu do anode. Zato možemo pisati da je kinetička energija tih elektrona, koji se kreću brzinom v_m , jednaka:



Slika 1.6: Zavisnost fotostruje od napona između elektroda u eksperimentu demonstracije fotoelektričnog efekta.

$$\frac{1}{2}m_e v_m^2 = eU_k, \quad (1.29)$$

gdje je $m_e = 9,109\,389\,7(54) \cdot 10^{-31}$ kg masa, a $-e$ nanelektrisanje elektrona ($e = 1,602\,177\,33(49) \cdot 10^{-19}$ C je elementarno nanelektrisanje). Dakle, mjerljivom naponu kočenja možemo izračunati maksimalnu brzinu fotoelektrona.

Istraživanja su vršena sa katodama od različitih metala. Pokazalo se da za svaki metal postoji *granična frekvencija* ν_g svjetlosti sa kojom se još može postići fotoelektrični efekat. Čak i kada je intenzitet svjetlosti jak, ako joj je frekvencija niža od te granične frekvencije ona ne može da izazove fotoelektrični efekat. Međutim, ako je $\nu > \nu_g$ već i svjetlost slabog intenziteta može da izbaci elektrone iz metala. Ova pojava se nije mogla objasniti primjenom klasične fizike. Brzina fotoelektrona bi, u skladu sa klasičnim zakonima, trebala da raste sa povećanjem intenziteta elektromagnetskih talasa. Zato nije bilo jasno zašto svjetlost niske frekvencije, a visokog intenziteta, nije u stanju da izazove fotoelektrični efekat. S druge strane, ako je intenzitet elektromagnetskog talasa nizak, klasično gledano, potrebno je dugo vremena da elektromagnetski talas preda svoju energiju elektronu. Nasuprot tome, eksperiment je pokazao da do fotoelektričnog efekta dolazi gotovo istovremeno kada svjetlost frekvencije $\nu > \nu_g$ obasja katodu, bez obzira koliko nizak njen intenzitet bio. Sa povećanjem intenziteta svjetlosti samo se povećava struja zasićenja.

Ove probleme je riješio Einstein 1905. godine. On je pokazao da se sve zakonitosti fotoelektričnog efekta mogu objasniti ako se pretpostavi da je *svjetlost*, kao i sve druge vrste elektromagnetskog zračenja, *kvantizirana* i da se *apsorbuje u tačno određenim "porcijama"* – *kvantima energije $h\nu$* . Ovo predstavlja dopunu Planckove hipoteze, po kojoj je energija oscilatora koji emituje elektromagnetno zračenje kvantizirana i može imati vrijednosti $n h\nu$. Dakle, po Einsteinu, svjetlost ne samo da se emituje, već se i apsorbuje u kvantima $h\nu$. Štaviše, može se smatrati da se svjetlost sastoji od čestica – kvanata svjetlosti, koje se nazivaju fotoni (naziv foton predložio je 1926. godine Lewis [G. N. Lewis (Luis)]. Pri interakciji sa elektronom foton može da mu preda svoju energiju $h\nu$. Prema tome, energija koju elektron prima ne zavisi od intenziteta svjetlosti, već od njene frekvencije, što se slaže sa eksperimentima. Definišimo *izlazni rad A* kao najmanju energiju koju je potrebno predati elektronu da bi se on udaljio iz čvrstog ili tečnog tijela u vakuum. Dio energije fotona koju je elektron apsorbovaо troši se upravo na taj izlazni rad. Ako se elektron, nakon što je oslobođen, još ne nalazi na samoj površini, već na nekoj dubini, dio energije fotona se može potrošiti na slučajne sudare tog elektrona (označimo tu energiju sa E_s). Preostali dio energije pretvara se u kinetičku energiju $E_k = m_e v^2 / 2$ elektrona koji je napustio površinu tijela. Energija E_k će biti maksimalna ako je $E_s = 0$. Za metale je karakteristično to da se veliki broj elektrona već nalazi na površini, pa se za njih može uzeti da je $E_s = 0$. U tom slučaju vrijedi relacija:

$$h\nu = \frac{1}{2}m_e v_m^2 + A, \quad (1.30)$$

koja se naziva *Einsteinova formula za fotoelektrični efekat*. Iz te formule je jasno da, ako je energija fotona manja od izlaznog rada A , do fotoelektričnog efekta neće doći. Prema tome, granična frekvencija svjetlosti, pri kojoj dolazi do fotoelektričnog efekta, je:

$$\nu_g = A/h. \quad (1.31)$$

Na osnovu relacije $\lambda = c/\nu$ slijedi da je fotoelektrični efekat moguć ako je talasna dužina:

$$\lambda \leq \lambda_g = hc/A. \quad (1.32)$$

Frekvencija ν_g , odnosno talasna dužina λ_g , se naziva *crvena granica fotoelektričnog efekta*.

Bilo je potrebno više od deset godina da se Einsteinova formula provjeri eksperimentalno sa dovoljnom tačnošću da bi se na osnovu nje mogla odrediti Planckova konstanta. Problem je bio u tome što izlazni rad metala zavisi

od stanja površine metala (od oksida i nečistoća na njoj). 1916. godine američki fizičar Millikan (Robert Andrews Millikan (Miliken), 1868.-1953.) je napravio uređaj pomoću koga je površinu metala čistio u vakuumu, nakon čega je mjerio izlazni rad i istraživao zavisnost maksimalne kinetičke energije fotoelektrona [određivao ju je mjereći napon kočenja, vidjeti jednačinu (1.29)] od frekvencije svjetlosti. Rezultati su se u potpunosti slagali sa Einsteinovom formulom. Štaviše, Millikan je odredio vrijednost Planckove konstante i pokazao da se ona podudara sa vrijednošću h nađenom iz spektralne raspodjele gustoće energije toplotnog zračenja (Planckova formula). Iako različiti metali imaju različite vrijednosti A i ν_g , eksperimenti su pokazali da za sve njih vrijedi Einsteinova formula sa istom vrijednošću Planckove konstante h . Za svoj eksperimentalni rad Millikan je dobio Nobelovu nagradu 1923. godine, dvije godine nakon što je Einstein dobio Nobelovu nagradu za svoje teorijsko objašnjenje fotoelektričnog efekta.

Pri razmatranju fotoelektričnog efekta pretpostavili smo da elektron apsorbuje energiju samo jednog fotona, tj. da se radi o jednofotonskom procesu. Sa otkrićem lasera, koji predstavljaju izvore zračenja vrlo jakog intenziteta, postalo je moguće ostvariti multifotonske procese kod kojih fotoelektron apsorbuje energiju N fotona ($N \geq 2$). Einsteinova formula za *multifotoniski fotoefekat* glasi:

$$Nh\nu = \frac{1}{2}m_e v_m^2 + A. \quad (1.33)$$

Granična frekvencija ν_g se smanjuje N puta, a crvena granica fotoefekta se pomjera prema dužim talasima (λ_g je N puta veće).

Osim vanjskog fotoelektričnog efekta o kojem smo do sada govorili, postoji i *unutrašnji fotoelektrični efekat*. On se zapaža u dielektrima i poluprovodnicima. Pri njemu ne dolazi do emisije elektrona, već se oni samo odvajaju od atoma i zadržavaju se unutar dielektrika, odnosno poluprovodnika. Takvi elektroni povećavaju električnu vodljivost.

1.2.2 Comptonov efekat

I pored uspješnog Einsteinovog objašnjenja fotoelektričnog efekta, fizičari još nisu bili u potpunosti ubijedeni u korpuskularnu prirodu fotona. Nju je definitivno potvrdio američki fizičar Compton (Arthur Compton (Kompton), 1892.-1962.), koji je 1923. godine otvio da pri rasijanju rendgenskih zraka na različitim materijalima može doći do promjene talasne dužine upadnog zračenja (ova pojava je po njemu nazvana Comptonov efekat). Prema zakonima klasične fizike talasna dužina upadnog zračenja se ne mijenja pri rasijanju. Međutim, ako se pretpostavi da su fotoni čestice i da u elastičnom

sudaru predaju dio svoje energije elektronima, analogno elastičnom sudaru klasičnih čestica, Comptonov efekat se može sasvim dobro objasniti. Jednostavnim izvođenjem (primjenjuju se zakoni očuvanja energije i impulsa; vidjeti zadatak 1.2.6), dobija se da se pri rasijanju fotona energije $h\nu$ i impulsa $p = \frac{h}{2\pi} k = \frac{h}{\lambda}$ na slobodnim elektronima, pri čemu foton skreće za ugao θ , njegova talasna dužina poveća za:

$$\Delta\lambda = \lambda_C (1 - \cos \theta), \quad \lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 2,462\,310\,58(22) \cdot 10^{-12} \text{ m.} \quad (1.34)$$

Konstanta λ_C naziva se Comptonova talasna dužina. Rezultati eksperimentalnih istraživanja rasijanja X-zraka na elektronima u čvrstim tijelima se dobro slažu sa ovom formulom. Ako se intenzitet zračenja rasijanog za određeni ugao mjeri kao funkcija talasne dužine X-zraka, zapaža se maksimum upravo za talasnu dužinu koju predviđa formula (1.34). Maksimum intenziteta koji je zapažen u eksperimentu ima malu, ali ipak konačnu, širinu. To se može objasniti time da elektroni u čvrstim tijelima nisu obavezno u stanju mirovanja već mogu imati neki konačni impuls prije sudara. Prema tome, Comptonovo rasijanje se može koristiti da se izmjeri impuls elektrona.

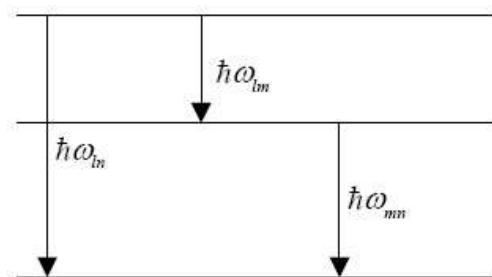
I fotoelektrični i Comptonov efekat su povezani sa interakcijom između elektromagnetskog zračenja i elektrona i potvrđuju fotonsku prirodu elektromagnetnih talasa. Međutim, možemo se zapitati zašto postoje dva različita efekta, tj. zašto se fotoni X-zračenja rasijavaju na elektronima uz promjenu talasne dužine, dok optički fotoni (u fotoefektu) prenose svu svoju energiju fotoelektronima. Osnovni razlog je taj što je u slučaju X-zraka energija fotona mnogo veća nego energija veze elektrona u čvrstom tijelu, dok je kod fotoefekta energija fotona samo malo veća od energije veze elektrona. U procesu rasijanja X-zraka elektron biva direktno izbačen iz čvrstog tijela i mogu se primijeniti zakoni očuvanja energije i impulsa za foton i elektron, dok se pri fotoefektu impuls razmjenjuje između elektrona i atoma metala. Pri fotoefektu ukupna energija fotona služi za oslobođanje elektrona i povećanje njegove kinetičke energije. I pored tih razlika, u obadva slučaja zaključak je da upadno elektromagnetsko zračenje pokazuje osobine koje su u saglasnosti sa tim da se ono sastoji od fotona čija energija i impuls su dati formulama:

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \quad (1.35)$$

Planckova konstanta $h = 6,626\,075\,5(40) \cdot 10^{-34}$ Js, koja povezuje energiju fotona sa njegovom frekvencijom, je fundamentalna konstanta. Ponekad je pogodno promijeniti notaciju i definisati konstantu $\hbar = h/(2\pi)$, $\hbar = 1,054\,572\,66(63) \cdot 10^{-34}$ Js. U tom slučaju se umjesto frekvencije ν koristi ugaona frekvencija $\omega = 2\pi\nu$.

1.2.3 Linijski spektri i klasifikacija spektralnih linija

Prilikom električnog pražnjenja u gasu atomi gase se pobudjuju i emituje se elektromagnetsko zračenje. Spektroskopskom analizom toga zračenja je otkriveno da se ono sastoji od serija linija čije talasne dužine zavise od vrste gase korištenog u eksperimentima (slika 1.7). Švajcarski fizičar Ritz (Walter



Slika 1.7: Prelazi između energetskih nivoa: Ritzov princip kombinovanja.

Ritz (Ric), 1878.-1909.) je 1908. godine formulisao princip kombinovanja po kome se nove spektralne linije mogu naći kombinovanjem (sabiranjem ili oduzimanjem) dviju poznatih spektralnih linija. Postojanje spektralnih linija je povezano sa prelazima (elektrona) između diskretnih energetskih nivoa atoma. Razmotrimo prelaz atoma iz stanja sa energijom E_l u stanje sa energijom E_n . Prema jednačini (1.35) i zakonu očuvanja energije, frekvencija fotona emitovanog pri prelazu elektrona između ta dva nivoa je:

$$\hbar\omega_{ln} = E_l - E_n = E_l - E_m + E_m - E_n, \quad (1.36)$$

gdje smo na desnoj strani oduzeli i dodali energiju nekog drugog nivoa E_m . Za frekvencije vrijedi relacija:

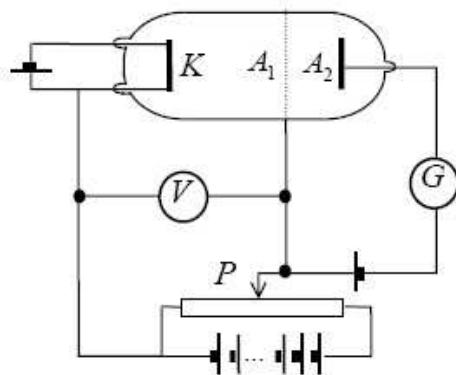
$$\omega_{ln} = \omega_{lm} + \omega_{mn}, \quad (1.37)$$

što je u skladu sa Ritzovim principom kombinovanja. Serije spektralnih linija su rezultat prelaza sa viših energetskih nivoa na zajednički nivo.

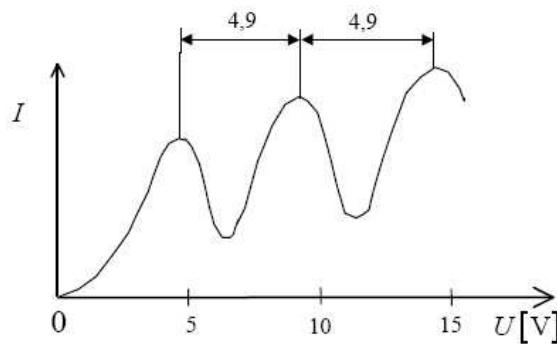
1.2.4 Franck-Hertzov eksperiment

Još jedan eksperiment koji je demonstrirao kvantiziranje energije je čuveni Franck-Hertzov eksperiment. Njega su izveli Franck (James Franck (Frank), 1882.-1964.) i Hertz (Gustav Hertz (Herc), 1887.-1975.) 1913. godine. Šema njihovog uređaja predstavljena je na slici 1.8. U vakuumskoj cijevi se nalazi

razrijedena živina para (atomi žive u gasovitom stanju). Katoda K se zagrijava i emituje elektrone (termoelektronska emisija) koji se kreću kroz gas prema anodi A_1 pod djelovanjem razlike potencijala između katode K i anode A_1 . Ta razlika potencijala se mjeri voltmetrom V , a mijenja se pomoću potenciometra P . Iza anode A_1 , koja je u obliku mrežice, nalazi se druga anoda A_2 , koja služi kao kolektor elektrona. Između anoda postoji mala ($0,5$ V) usporavajuća razlika potencijala. Galvanometar G registruje struju elektrona koji su uspjeli savladati tu potencijalnu razliku i stići do kolektorske anode A_2 . U eksperimentu se snimala zavisnost jačine struje na galvanometru od razlike potencijala U između katode K i anode A_1 . Dobijeni rezultati predstavljeni su na slici 1.9. Zapaža se da jačina struje monotono raste



Slika 1.8: Šema Franck-Hertzovog eksperimenta.



Slika 1.9: Zavisnost struje od potencijalne razlike u Franck-Hertzovom eksperimentu.

i dostiže maksimum kada je $U = 4,9$ V, nakon čega naglo opada, da bi sa daljim povećanjem razlike potencijala U ponovo počela rasti. Drugi maksimum struja dostiže za $U = 9,8$ V, nakon čega ponovo naglo opada, a zatim

raste. Treći maksimum dostiže za $U = 14,7$ V itd. Rezultati eksperimenta se mogu jednostavno objasniti primjenom Bohrove teorije. Atomi žive u gasu su u osnovnom stanju sa energijom E_1 . Da bi ih elektroni sudarima preveli u prvo pobuđeno stanje čija je energija E_2 , moraju im predati u neelastičnom sudaru energiju $E_2 - E_1$. Kinetička energija elektrona je $m_e v^2 / 2 = eU$. Sve dok je razlika potencijala U takva da je $eU < E_2 - E_1$, sudari elektrona i atoma žive su elastični. Pošto je masa elektrona mnogo manja od mase atoma žive, energija elektrona se pri takvom sudaru praktično ne mijenja, tako da oni uspijevaju da savladaju usporavajući napon između anoda i padnu na kolektorsku anodu. Sve dok je $eU < E_2 - E_1$ sa povećanjem U i struja će rasti. Za $eU = E_2 - E_1$ elektroni mogu u neelastičnom sudaru predati svoju energiju atomima žive i tako ih pobuditi. Pošto su ti elektroni izgubili svoju energiju oni više nisu u stanju da savladaju potencijalnu razliku između anoda, što se zapaža kao nagli pad struje. Daljim povećanjem napona sve više elektrona uspijeva da, i pored toga što je dio svoje energije u neelastičnom sudaru predalo atomima žive, dospije do kolektorske anode, tako da opet zapažamo rast struje. Za $U = 2 \cdot 4,9$ V = 9,8 V elektron ima dovoljno energije da može dva puta u neelastičnom sudaru da pobudi atome žive. U tom slučaju, elektronima opet ne preostaje dovoljno energije da stignu do anode A_2 i struja naglo opada. Pri još većim naponima moguće je da dođe do tri uza-stopna neelastična sudara, tako da se treći maksimum javlja pri $U = 14,7$ V, itd. Dakle, u Franck-Hertzovom eksperimentu je neposredno izmjerena razlika energija prvog pobuđenog i osnovnog stanja atoma žive. Ona iznosi: $E_2 - E_1 = eU = 4,9$ eV. Pobuđeni atomi žive brzo (za oko 10^{-8} s) spontano prelaze u osnovno stanje. Pri tome se emituje fotoni energije $h\nu = 4,9$ eV. Talasna dužina tih fotona je $\lambda = hc/(eU) = 253$ nm. Franck i Hertz su u svom eksperimentu zaista i registrovali elektromagnetsko zračenje te talasne dužine (to je poznata živina ultraljubičasta linija). Rezultati ovoga eksperimenta su predstavljali pravi trijumf kvantne teorije i od tada se ona više nije smatrala samo hipotezom, već su naučnici prihvatali realnost postojanja diskretnih energetskih nivoa i kvantiziranje energije.

1.2.5 Stern-Gerlachov eksperiment

Stern (Otto Stern (Štern), 1888.-1969., Nobelovu nagradu za fiziku dobio je 1943. godine) i Gerlach (Walther Gerlach (Gerlah), 1889.-1979.) su 1921. i 1922. godine izveli slijedeći eksperiment. Paralelni snop atoma, dobijen isparavanjem zagrijanog srebra, usmjeren je između dva magneta koji su davali jako nehomogeno magnetno polje. Kada je magnetno polje isključeno, atomi srebra se kreću pravolinijski i na foto-ploči iza magneta ostavljaju trag u obliku jedne prave linije. Kada se uključi magnetno polje, ako bi vrijedila

klasična fizika, atomi bi se “rasuli” tako da bi se na foto-ploči dobila kontinuirana mrlja. Međutim, eksperiment je pokazao da postoje dvije bočne linije, tj. da se snop podijelio na dva dijela. Pojava dva maksimuma pokazuje da se magnetni moment atoma srebra ne orjentiše proizvoljno u magnetnom polju, već da postoje dvije moguće orijentacije toga momenta (sila uzrokovana nehomogenošću magnetnog polja skreće snop lijevo odnosno desno u odnosu na slučaj kada je polje isključeno). Kasnije se pokazalo da dvjema mogućim orijentacijama u magnetnom polju odgovaraju slijedeće (kvantizirane) vrijednosti magnetskog spinskog broja: $m_s = +1/2$ i $m_s = -1/2$. Na taj način je uspješno objašnjen Stern-Gerlachov eksperiment. Dakle, nisu samo energija i impuls kvantizirani, već to mogu biti i druge fizikalne veličine.

1925. godine imali smo situaciju da se eksperimentalni rezultati mogu kvalitativno objasniti primjenom klasične fizike, dopunjene postulatima o kvantiziranju fizikalnih veličina i uvođenjem spina. Atom je posmatran po analogiji sa planetarnim sistemom. Vrlo brzo se pokazalo da je takva slika atoma pogrešna. Atom se ponaša po posebnim zakonima koji važe u mikrosvjetu i na njega se ne može primijeniti klasična Newtonova mehanika. U narednih nekoliko godina formulisana je nova teorija koja je nazvana kvantna mehanika.

1.2.6 Zadaci

Zadatak 1.2.1. Da li vidljivo zračenje može da izazove disocijaciju molekula:
 a) bromida srebra (AgBr) čija je energija disocijacije $E_d = 1,04 \text{ eV}$,
 b) molekula kisika O_2 za koje je energija veze dva atoma koji grade molekulu $E_v = 7 \text{ eV}$?

Rješenje: a) $\lambda_{\max} = hc/E_d = 1192 \text{ nm}$, b) $\lambda_{\max} = hc/E_v = 177 \text{ nm}$. Granice vidljivog dijela spektra su 380 nm i 760 nm. Dakle, vidljivo zračenje može da izazove disocijaciju molekula AgBr , tj. može da ostavi trag na foto-ploči. Ono ne može da izazove disocijaciju molekula kisika. Do disocijacije molekula kisika u gornjim slojevima Zemljine atmosfere dolazi pod djelovanjem ultraljubičastih Sunčevih zraka.

Zadatak 1.2.2. Crvena granica fotoefekta za platinu je $\lambda_g = 198 \text{ nm}$. Kaljenjem platine na visokoj temperaturi promijeni se crvena granica fotoefekta na $\lambda'_g = 220 \text{ nm}$. Za koliko je kaljenjem smanjen izlazni rad?

Rješenje: $A = hc/\lambda_g = 1,23984/\lambda [\mu\text{m}] = 6,262 \text{ eV}$, $A' = hc/\lambda'_g = 5,636 \text{ eV}$, $A - A' = 0,626 \text{ eV}$.

Zadatak 1.2.3. Crvena granica fotoefekta za srebro je $\lambda_g = 261 \text{ nm}$. Naći izlazni rad elektrona sa površine srebra. Izračunati maksimalnu brzinu

emitovanih fotoelektrona ako je talasna dužina fotona 200 nm.

Rješenje: Izlazni rad je: $A = h\nu_g = hc/\lambda_g = 7,61 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 4,75 \text{ eV}$. Einsteinova formula za fotoekat se može prepisati u obliku $hc/\lambda = hc/\lambda_g + mv_m^2/2$, odakle je: $v_m = \sqrt{\frac{2hc}{m_e} \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_g} \right)} = 7,139 \cdot 10^5 \text{ m s}^{-1}$.

Zadatak 1.2.4. Granična frekvencija fotoelektričnog efekta za natrijum je $\nu_g = 5,44 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$. Kojem dijelu spektra odgovara ova granična frekvencija? Naći izlazni rad iz materijala. Izračunati frekvenciju i talasnu dužinu svjetlosti koja je u stanju da izbije elektrone iz katode od natrijuma i izazove fotostruju, ako je usporavajući napon između katode i anode $U = 2 \text{ V}$.

Rješenje: $\lambda_g = c/\nu_g = 551 \text{ nm} \rightarrow$ zelena svjetlost. $A = h\nu_g = 2,25 \text{ eV}$. $eU = m_e v_m^2/2$, $h\nu = A + eU$, $\nu = (A + eU)/h = 4,25 \text{ eV} / (6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}) = 1,03 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$, $\lambda = c/\nu = 292 \text{ nm}$ (ulraljubičasta svjetlost).

Zadatak 1.2.5. Površina metala je obasjana intenzivnim snopom iz neodijumskog lasera ($\lambda = 1,061 \mu\text{m}$) koji je u stanju da izazove multifotonski fotoelektrični efekat. Koliko najmanje fotona treba da apsorbuje elektron u multifotonском procesu ako je crvena granica jednofotonskog fotoelektričnog efekta za taj metal $\lambda_g = 220 \text{ nm}$?

Rješenje: $\lambda/\lambda_g = 1061/220 = 4,82 \Rightarrow N = 5$, $\lambda'_g = (1061/5) \text{ nm} = 212,2 \text{ nm}$.

Zadatak 1.2.6. Izvesti Comptonovu formulu primjenjujući zakone očuvanja energije i impulsa i: a) klasičnu mehaniku uz aproksimaciju da je relativna promjena impulsa mala, b) relativističku mehaniku.

Rješenje: Označimo impuls i energiju fotona prije sudara sa $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ i $E = \hbar\omega$, gdje je $\hbar = h/(2\pi)$ Planckova konstanta podijeljena sa 2π , \mathbf{k} talasni vektor ($|\mathbf{k}| = k = \omega/c$), a $\omega = 2\pi\nu$ ugaona frekvencija. Foton se sudara sa elektronom mase m_e koji miruje. Impuls i energija fotona poslije sudara su $\mathbf{p}' = \hbar\mathbf{k}'$ i $E' = \hbar\omega'$.

a) Kinetička energija i impuls elektrona nakon sudara su $E_e = \mathbf{p}_e^2/(2m_e)$ i \mathbf{p}_e . Zakoni očuvanja energije i impulsa glase:

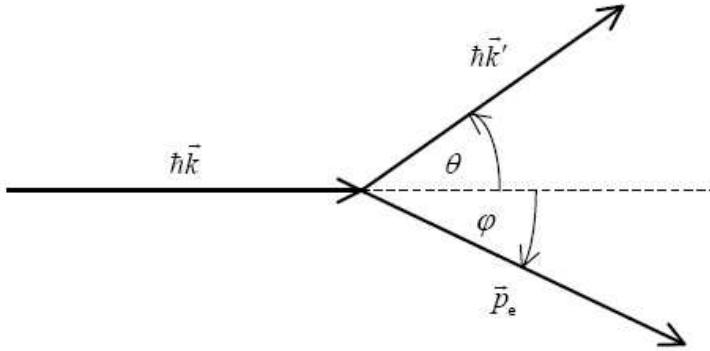
$$\hbar\omega = \hbar\omega' + \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e}, \quad (1.38a)$$

$$\hbar\mathbf{k} = \hbar\mathbf{k}' + \mathbf{p}_e. \quad (1.38b)$$

Kvadriranjem $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ iz jednačine (1.38b) i uvrštavanjem rezultata u jednačinu (1.38a), dobija se:

$$\hbar(\omega - \omega') = \frac{\hbar^2}{2m_e} (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left[(k - k')^2 + 2kk' (1 - \cos\theta) \right], \quad (1.39)$$

gdje je θ ugao između vektora \mathbf{k} i \mathbf{k}' (vidjeti sliku).



Prema uslovu zadatka možemo zanemariti promjenu amplitudne talasnog vektora ($k - k'$) u odnosu na k ili k' , tako da se prvi član u kvadratnoj zagradi na desnoj strani jednačine (1.39) može zanemariti. Tada, ako podijelimo jednačinu (1.39) sa $\hbar\omega\omega' = \hbar ck ck'$, dobijamo:

$$\frac{1}{\omega'} - \frac{1}{\omega} = \frac{\hbar}{m_e c^2} (1 - \cos \theta), \quad (1.40)$$

odakle je:

$$\lambda' - \lambda = \frac{\hbar}{m_e c} (1 - \cos \theta), \quad (1.41)$$

čime je dokazana Comptonova formula (1.34).

b) Označavajući odnos brzine elektrona i brzine svjetlosti sa $\beta = v_e/c$, relativistički zakoni očuvanja energije i impulsa se mogu napisati u obliku:

$$\hbar\omega + m_e c^2 = \hbar\omega' + \frac{m_e c^2}{2\sqrt{1-\beta^2}}, \quad (1.42a)$$

$$\hbar\mathbf{k} = \hbar\mathbf{k}' + \frac{m_e \mathbf{v}_e}{2\sqrt{1-\beta^2}}. \quad (1.42b)$$

Kvadriranjem jednačine (1.42a) dobijamo:

$$\left(\frac{\hbar\omega}{c} - \frac{\hbar\omega'}{c} + m_e c \right)^2 = \frac{m_e^2 c^2}{1-\beta^2}. \quad (1.43)$$

Da bismo dobili vezu ugla rasijanja i izmjene frekvencije fotona, rastavit ćemo jednačinu (1.42b) na komponente koje su paralelne i okomite na smjer

upada fotona:

$$\frac{\hbar\omega}{c} - \frac{\hbar\omega'}{c} \cos \theta = \frac{m_e v_e}{\sqrt{1 - \beta^2}} \cos \varphi, \quad (1.44a)$$

$$\frac{\hbar\omega'}{c} \sin \theta = \frac{m_e v_e}{\sqrt{1 - \beta^2}} \sin \varphi. \quad (1.44b)$$

Kvadriranjem i sabiranjem jednačine (1.44a) i (1.44b) dobijamo:

$$\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2 - 2\frac{\hbar\omega}{c} \frac{\hbar\omega'}{c} \cos \theta + \left(\frac{\hbar\omega'}{c}\right)^2 = \frac{m_e^2 v_e^2}{1 - \beta^2}. \quad (1.45)$$

Oduzimanjem jednačine (1.43) od jednačine (1.45) nalazimo da je:

$$\omega - \omega' = \frac{\hbar}{m_e c^2} \omega \omega' (1 - \cos \theta), \quad (1.46)$$

odakle lako dobijamo Comptonovu formulu (1.34).

Zadatak 1.2.7. Odrediti maksimalnu relativnu promjenu talasne dužine pri rasijanju fotona: a) vidljive svjetlosti talasne dužine 550 nm, b) ultraljubičastog zračenja talasne dužine 150 nm i c) rendgenskog zračenja koje se dobija pri naponu od 2480 V na krajevima rendgenske cijevi.

Rješenje: Relativna promjena talasne dužine je maksimalna za rasijanje unazad ($\theta = 180^\circ$) i iznosi: $(\Delta\lambda/\lambda)_{\max} = \lambda_C (1 - \cos 180^\circ)/\lambda = 2\lambda_C/\lambda$.

- a) $(\Delta\lambda/\lambda)_{\max} = 2 \cdot 2,46231 \cdot 10^{-3} \text{ nm}/550 \text{ nm} = 8,95 \cdot 10^{-6} = 8,95 \cdot 10^{-4} \%$,
 b) $(\Delta\lambda/\lambda)_{\max} = 3,28 \cdot 10^{-3} \%$, c) $\lambda = hc/(eU) = 0,5 \text{ nm}$, $(\Delta\lambda/\lambda)_{\max} = 0,985 \%$.

Dakle, relativna promjena talasne dužine je zanemarljivo mala za vidljivu i ultraljubičastu svjetlost, a za rendgensko zračenje je reda veličine jednog postotka.

Zadatak 1.2.8. Pokazati pomoću zakona održanja energije i impulsa da slobodni elektron ne može u potpunosti apsorbovati foton.

Rješenje: Pretpostavimo da takav foton postoji i da mu je frekvencija $\nu \neq 0$. Zakon održanja energije glasi: $h\nu + m_e c^2 = mc^2$, gdje je m_e masa elektrona, a $m = m_e (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$. Na osnovu zakona održanja impulsa: $h\nu/c = mv$ je $h\nu = mvc$, što, uvrštavanjem u zakon održanja energije, daje: $mvc + m_e c^2 = mc^2$, tj. $1 - v/c = m_e/m = \sqrt{1 - v^2/c^2} \Rightarrow v = 0 \Rightarrow \nu = 0 \Rightarrow$ kontradikcija. Da bi elektron u potpunosti apsorbovao foton, u procesu treba učestrovati i "treće tijelo" (npr. površina metala) koje "preuzima" dio impulsa.

Zadatak 1.2.9. Ako se u eksperimentu analognom Franck-Hertzovom umjesto živine pare koriste pare atoma natrijuma, maksimumi se pojavljuju pri razlici potencijala od: 2,1 V, 4,2 V, 6,3 V itd. Kolika je talasna dužina emitovanog zračenja?

Rezultat: $\lambda = hc/(eU) = 590,4 \text{ nm}$.

Zadatak 1.2.10. Kolika treba da bude energija slobodnih elektrona da bi oni u neelastičnom sudaru pobudili atome vodonika koji su u osnovnom stanju? Ako je energija slobodnih elektrona: a) 5 eV, b) 15 eV, kolika je njihova energija nakon sudara? Kolika je talasna dužina fotona koji su u stanju da izvrše to isto pobuđenje?

Rješenje: Razlika energija prvog pobuđenog i osnovnog stanja atoma vodonika je: $\Delta E = E_2 - E_1 = (1 - 1/4)\text{Ry} = 10,2 \text{ eV}$. Dakle, minimalna energija slobodnih elektrona je 10,2 eV.

- Slobodni elektroni sa energijom od 5 eV nemaju dovoljno energije da u neelastičnom sudaru pobude atome vodonika. Sudari su elastični i, zbog velike razlike između masa elektrona i atoma, energija slobodnih elektrona nakon sudara ostaje nepromijenjena, tj. jednaka je 5 eV.
- Slobodni elektroni sa energijom 15 eV u neelastičnom sudaru predaju atomu energiju, tako da im je energija nakon sudara: $E' = E - \Delta E = 4,8 \text{ eV}$. $\lambda_{\max} = hc/\Delta E = 121,6 \text{ nm}$.

1.3 Talasni aspekti čestica

Istraživanja prirode svjetlosti su pokazala da se, zavisno od vrste izvršenog eksperimenta, svjetlost opisuje ili pomoću elektromagnetskih talasa ili pomoću čestica (fotona). Talasna priroda se manifestuje u kontekstu fenomena difrakcije i interferencije, dok se korpuskularna (čestična) priroda ispoljava najjasnije u fotoelektričnom efektu. Dakle, za svjetlost su nam relacije koje opisuju dualnost talas-čestica već poznate – energija i impuls fotona su povezani sa frekvencijom ν i talasnim vektorom \mathbf{k} odgovarajućeg elektromagnetskog talasa relacijom (1.35). Ali šta je sa materijalnim česticama? Njihova korpuskularna priroda je prilično očita. Pitanje je da li i one ispoljavaju talasnu prirodu, tj. da li posjeduju talasne aspekte.

1.3.1 De Broglievi talasi

De Broglie (Prince Louis Victor De Broglie, 1892.-1987., francuski fizičar koji je Nobelovu nagradu za fiziku dobio 1929. godine) je, pored njihove korpuskularne prirode, česticama pripisao i talasne osobine i prepostavio

da se sve relacije poznate za elektromagnetne talase mogu primijeniti na materijalne čestice. Ono što vrijedi za fotone, trebalo bi da vrijedi za bilo koji tip čestica. Prema korpuskularnoj slici, čestici mase m koja se kreće uniformno sa brzinom \mathbf{v} , u prostoru bez polja, pridružujemo energiju E i impuls \mathbf{p} . U talasnoj slici, čestica je opisana pomoću frekvencije ν i talasnog vektora \mathbf{k} . Pošto ova dva opisa, prema de Broglieu, označavaju dva različita aspekta istih materijalnih čestica, trebale bi da vrijede slijedeće veze između navedenih karakterističnih veličina:

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} = \frac{h}{\lambda} \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}. \quad (1.47)$$

U prethodnim odjeljcima smo vidjeli da su ove jednačine tačne za fotone (elektromagnetno polje). Sada su one postulirane kao tačne za *sve* čestice. Svakoj slobodnoj čestici, shvaćenoj u ovom smislu, pridružen je ravni talas, određen do na amplitudu A ,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (1.48a)$$

koji se, koristeći relacije (1.47), može prepisati kao:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A \exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar]. \quad (1.48b)$$

Prema de Broglieu, ravni talas pridružen čestici ima talasnu dužinu:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}, \quad (1.49)$$

gdje posljednja jednakost vrijedi samo za čestice sa masom različitom od nule. Pošto je brojna vrijednost Planckove konstante h mala, to masa čestice mora biti dovoljno mala da bi njena talasna dužina bila mjerljiva. Upravo zbog toga talasni karakter materije dolazi do izražaja u atomskoj fizici. Oblik funkcije ψ ostaje očuvan u svakom trenutku t , pri čemu se talas kreće uniformno brzinom \mathbf{u} . Faza

$$\alpha = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t = \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u}t) \quad (1.50)$$

talasa $\psi(\mathbf{r}, t)$ ostaje konstantna u toku vremena, $d\alpha/dt = \mathbf{k} \cdot \dot{\mathbf{r}} - \omega = 0$, tako da je *fazna brzina* $\mathbf{u} = \dot{\mathbf{r}}$. Pošto \mathbf{k} i \mathbf{u} imaju isti smjer, to je:

$$|\mathbf{u}| = \frac{\omega}{k}. \quad (1.51)$$

Talase koji, prema de Brogljevoj hipotezi, odgovaraju materijalnim česticama ćemo nazivati materijalnim talasima ili talasima materije. Pokažimo sada da takvi talasi ispoljavaju disperziju, tj. njima pridružena ugaona

frekvencija ω se mijenja sa promjenom amplitude valnog vektora. Za energiju slobodne čestice u relativističkoj fizici vrijedi relacija $E^2 = m^2c^4 + p^2c^2$. Za $v \ll c$, ona se može napisati kao

$$E = \sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2} = mc^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \dots \quad (1.52)$$

Tada se, koristeći relacije $\omega = E/\hbar$ i $p = \hbar k$, za ugaonu frekvenciju ω , kao funkciju talasnog broja k , dobija izraz:

$$\omega(k) = \frac{mc^2}{\hbar} + \frac{\hbar k^2}{2m} + \dots \quad (1.53)$$

Prema tome, fazna brzina $u = \omega/k$ je funkcija k , tj.

$$u(k) = \frac{mc^2}{\hbar k} + \frac{\hbar k}{2m} + \dots, \quad (1.54)$$

tako da talasi materije, čak i u vakuumu, pokazuju disperziju. Talasi sa različitim talasnim brojem (talasnom dužinom) imaju različite fazne brzine. S druge strane, za faznu brzinu u važi slijedeća relacija:

$$u = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v}. \quad (1.55)$$

Pošto je $c > v$, fazna brzina talasa materije je uvijek veća od brzine svjetlosti u vakuumu. Masivne čestice se mogu kretati samo sporije od brzine svjetlosti u vakuumu c , tako da se fazna brzina u ne može identifikovati sa brzinom čestice.

Ako želimo da opišemo česticu kao prostorno ograničen entitet, ne možemo je opisati pomoću ravnog vala (1.48). Umjesto toga ćemo pokušati opisati česticu kao konačni talasni paket, koji je, pomoću Fourierovog integrala, napisan kao superpozicija harmonijskih talasa koji se razlikuju po talasnoj dužini i brzini prostiranja. Razmotrimo grupu talasa koji se kreće u smjeru x ose (pojednostavili smo problem posmatrajući jednodimenzionalno kretanje)

$$\psi(x, t) = \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} c(k) \exp \{i [kx - \omega(k)t]\} dk. \quad (1.56)$$

Ovdje je $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ srednji talasni broj grupe, a Δk je mjera (frekventnog) širenja talasnog paketa, pri čemu se pretpostavlja da je $\Delta k \ll k_0$. Ugaonu frekvenciju ω , koja je prema relaciji (1.53) funkcija od k , možemo razviti u Taylorov red u intervalu Δk oko k_0 , i zanemariti članove reda $(\Delta k)^n$, $n \geq 2$, tj.

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\omega}{dk^2} \right)_{k=k_0} (k - k_0)^2 + \dots. \quad (1.57)$$

Član $(d\omega/dk)_{k=k_0} = v_g$ je grupna brzina. Naime, u talasnoj fizici se pokazuje da se envelopa (obvojnica) grupe talasa kreće tzv. *grupnom brzinom*

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}, \quad (1.58)$$

koja, za sredine sa disperzijom, može biti različita od fazne brzine. Uvedimo novu varijablu integriranja $\xi = k - k_0$ i prepostavimo da se amplituda $c(k)$ sporo mijenja sa k u intervalu integriranja $2\Delta k$. Tada se (1.56) svodi na

$$\psi(x, t) = \exp \{i [k_0 x - \omega(k_0)t]\} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} \exp [i(x - v_g t)\xi] c(k_0 + \xi) d\xi. \quad (1.59)$$

Integriranjem, uz aproksimaciju $c(k_0 + \xi) \approx c(k_0)$, dobijamo

$$\psi(x, t) = C(x, t) \exp \{i [k_0 x - \omega(k_0)t]\}, \quad (1.60a)$$

$$C(x, t) = 2c(k_0) \frac{\sin [\Delta k(x - v_g t)]}{x - v_g t}. \quad (1.60b)$$

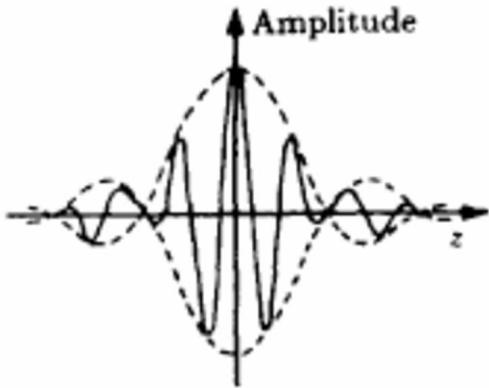
Pošto argument sinusne funkcije u (1.60b) sadrži malu veličinu Δk , funkcija $C(x, t)$ se sporo mijenja u zavisnosti od vremena t i koordinate x , tako da je možemo posmatrati kao amplitudu skoro monohromatskog talasa, pri čemu je faza tog talasa $k_0 x - \omega(k_0)t$. Ako pomnožimo brojnik i nazivnik amplitude sa Δk , uz oznaku $z = \Delta k(x - v_g t)$, vidimo da je amplituda određena faktorom $\sin z/z$, za koji vrijedi

$$\lim_{z \rightarrow 0} \frac{\sin z}{z} = 1 \quad \text{za } z = 0, \quad \frac{\sin z}{z} = 0 \quad \text{za } z = \pm\pi, \pm 2\pi, \dots \quad (1.61)$$

Funkcija $\sin z/z$ ima glavni maksimum za $z = 0$. Sa povećavanjem apsolutne vrijednosti z , ta funkcija naizmjenično poprima maksimume i minimume, čije su vrijednosti male u odnosu na glavni maksimum. Sa daljim povećavanjem apsolutne vrijednosti z funkcija $(\sin z)/z$ brzo teži ka nuli. Dakle, možemo zaključiti da posmatrana grupa talasa superpozicijom generiše talasni paket čija je amplituda različita od nule samo u konačnom području. Na slici 1.10 je ilustriran oblik takvog talasnog paketa u određenom trenutku. Amplituda talasnog paketa (1.60b) je maksimalna za $v_g t - x = 0$. To znači da se ravan maksimalne amplitudne kreće grupnom brzinom

$$\frac{dx}{dt} = v_g. \quad (1.62)$$

Zahtjev da je $|\psi(x, t)|^2$ konstantno, vodi na to da je $v_g t - x$ konstantno, odakle se diferenciranjem dobija $\dot{x} = v_g$. Dakle, fiksirana konstantna vrijednost $|\psi(x, t)|^2$ se kreće sa grupnom brzinom v_g . Diferenciranjem disperzije



Slika 1.10: Talasni paket: nekoliko brzo oscilirajućih talasa superpozicijom generišu grupu talasa konačne širine.

relacije za $\omega(k)$, jednačina (1.52), dobijamo

$$v_g = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0} = \left(\frac{\hbar k}{m} \right)_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p}{m}. \quad (1.63)$$

Pokažimo kako se grupna brzina može povezati sa brzinom čestice. Na osnovu relacije (1.47) je

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp}. \quad (1.64)$$

Promjena energije dE čestice koja se kreće pod uticajem sile $\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt$ na putu $d\mathbf{s}$ je $dE = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{s}$, pa imamo:

$$dE = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \cdot d\mathbf{s} = d\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}. \quad (1.65)$$

Pošto su \mathbf{v} i $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ paralelni, vrijedi slijedeća jednačina:

$$dE = |\mathbf{v}| |d\mathbf{p}| = v dp \quad \text{tj.} \quad \frac{dE}{dp} = v. \quad (1.66)$$

Dakle, grupna brzina talasa materije je identična brzini čestice:

$$v_g = v. \quad (1.67)$$

Zaključak da se grupna brzina grupe talas-čestica podudara sa klasičnom brzinom čestice ne vrijedi u opštem slučaju. Svi dosadašnji rezultati su dobiveni pod pretpostavkom da se svi članovi u razvoju (1.57) koji su reda većeg

od prvog mogu zanemariti. Ovo je ispravno sve dok nema disperzije u posmatranoj sredini. Pošto su de Broglievi talasi disperzivni čak i u vakuumu, to je $d^2\omega/dk^2 \neq 0$. Ovo implicira da talasni paket ne zadržava svoj oblik, nego se postepeno širi (svaki od više monohromatskih talasa koji formiraju paket ima neznatno različitu frekvenciju, pa, prema tome, i različitu brzinu kretanja). Ako je disperzija mala, tj.

$$\frac{d^2\omega}{dk^2} \approx 0 \quad (1.68)$$

u toku određenog vremenskog intervala, tada talasnom paketu možemo pridružiti određeni oblik. U tom slučaju možemo smatrati da se grupa talas-čestica kreće kao cijelina sa grupnom brzinom v_g .

Prema de Broglieu, mi svakoj čestici, koja se kreće ravnomjerno, pridružujemo ravni talas talasne dužine λ . Da bi se odredila talasna dužina, polazi se od de Broglieovih osnovnih jednačina (1.47). Za talasnu dužinu vrijede slijedeće relacije:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p}. \quad (1.69)$$

Ako prepostavimo da je brzina čestice mala, tj. $v \ll c$, i iskoristimo jednačinu $E = \mathbf{p}^2/(2m)$, dobijamo da je talasna dužina

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}, \quad (1.70)$$

što znači da talasna dužina zavisi od mase čestice. Tako, na primjer, elektronu sa kinetičkom energijom $E = 10$ keV i masom $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg, odgovara talasna dužina $\lambda_e = 0,122 \cdot 10^{-10}$ m.

Kao što znamo, rezolucija malog predmeta pod mikroskopom zavisi od talasne dužine svjetlosti koja se koristi da bi se on osvijetlio. Što je talasna dužina manja, manja je udaljenost između dviju tačaka koje se mogu razlučiti mikroskopom. Za talasnu dužinu iz vidljivog dijela spektra, npr. $\lambda_v \approx 500$ nm, moguće uvećanje mikroskopa je oko 2000 puta. Ako se umjesto fotona takve talasne dužine za "skeniranje" predmeta koriste elektroni, može se postići uvećanje do 500 000 puta i rezolucija od oko 0,5 – 1 nm. Talasna dužina koja odgovara protonima i mezonima sa energijom reda veličine GeV (10^9 eV) je tako mala da ih je moguće koristiti za istraživanje unutrašnje strukture jezgra.

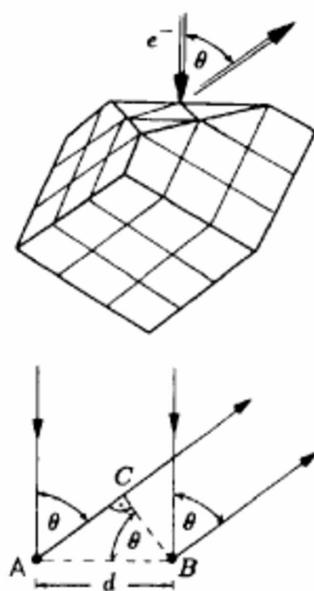
1.3.2 Difrakcija talasa materije

Fenomeni interferencije i difrakcije su jedinstveni dokazi talasnih pojava. Konkretno, destruktivna interferencija se ne može objasniti koristeći se korpuskularnom slikom. Dok fotoelektrični efekat i Comptonov efekat pokazuju

korpuskularnu prirodu svjetlosti, difrakcija elektronskih zraka dokazuje postojanje talasa materije.

Pošto je talasna dužina elektrona previše mala za difrakciju na vještačkoj rešetki, za rasijanje (raspršenje) se koristi kristalna rešetka. Ovi eksperimenti ustvari predstavljaju ponavljanje analognih istraživanja strukture kristala vršenih pomoću X-zraka.

Davisson (Clinton Joseph Davisson, 1881.-1958., Nobelova nagrada za fiziku mu je dodijeljena 1937. godine) i Germer (Lester Halbert Germer, 1896.-1971.) su primjenili Laueovu (Max von Laue, 1879.-1960.) metodu za difrakciju X-zraka. Ovdje se umjesto difrakcione rešetke koristi površina monokristala. Elektroni se rasijavaju na površini kristala, bez prodiranja u njegovu unutrašnjost. Slika 1.11 pokazuje eksperimentalnu postavku i putanju elektronskih zraka.



Slika 1.11: Šematski prikaz rasijanja talasa materije na kristalima.

Kao što se može vidjeti na slici, difrakcioni maksimum se pojavljuje u slučaju da je ispunjen uslov

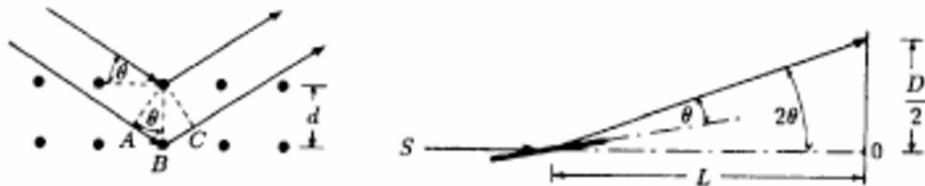
$$n\lambda = d \sin \theta. \quad (1.71)$$

Ako je elektron ubrzavan potencijalnom razlikom U , njegova energija je data sa eU , i iz (1.70) slijedi da je

$$\frac{nh}{d\sqrt{2me}} = \sqrt{U} \sin \theta, \quad (1.72)$$

što je potvrđeno eksperimentom.

Tartakowski i Thomson su u tu svrhu koristili Debye-Scherrerovu metodu rasijanja X-zraka. Ovdje do difrakcije monohromatskog zračenja X-zraka dolazi na tijelu koje se sastoji od kompresovanog kristalnog praška. Kristalni prašak predstavlja prostornu difrakcionu rešetku. Kristali su orientisani na proizvoljan način, tako da uvjek postoje kristali koji zadovoljavaju uslov da dođe do difrakcije. Na slici 1.12 možemo vidjeti putanje zraka.



Slika 1.12: Raspršivanje talasa materije na kristalu.

Difrakcioni maksimumi se pojavljuju pod uslovom (Wulf-Braggova relacija)

$$2d \sin \theta = n\lambda. \quad (1.73)$$

Zbog statističke raspodjele minikristala u kristalnom prašku, aparatura, a samim time i difrakciona slika, je simetrična u odnosu na osu \overline{SO} . Zbog radijalne simetrije slike interferencije, pojavljuju se krugovi oko tačke O na ekranu. Očito, vrijedi relacija $\tan(2\theta) = d/(2L)$, gdje je L udaljenost između raspršivača i ekrana. Eksperimentalna postavka je takva da su svi uglovi mali, dopuštajući aproksimaciju $\tan(2\theta) \approx 2\theta$. Na osnovu Wulf-Braggove relacije, dobija se

$$Dd = 2nL\lambda. \quad (1.74)$$

Ako su korišteni elektronski zraci, tada uvrštavamo de Broglievu talasnu dužinu (1.70) u gornju relaciju i dobijamo

$$D\sqrt{U} = \frac{2nL\hbar}{d\sqrt{2m_e e}}, \quad (1.75)$$

tj. kvadratni korijen napona ubrzavanja pomnožen sa radiusom difrakcionih krugova mora biti konstantan za bilo koji red difrakcije.

Eksperimentalni rezultati su bili u savršenom slaganju sa ovom formulom. Danas su elektronski zraci, i, posebno, neutronski zraci, važan alat koji se koristi u fizici čvrstog stanja da bi se odredila kristalna struktura.

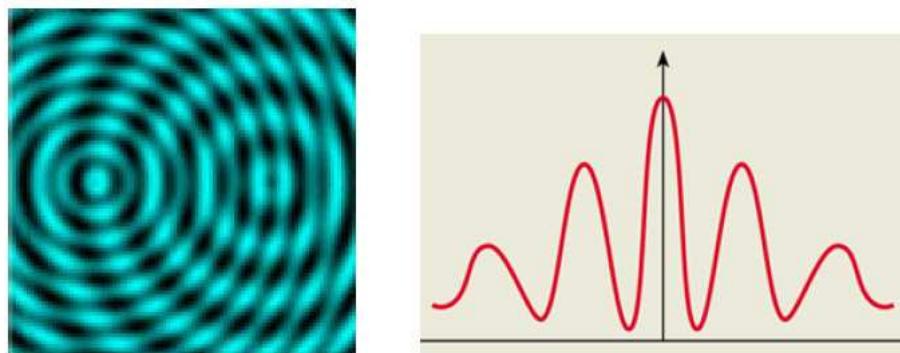
1.3.3 Statistička interpretacija talasa materije

Uvod. Double-slit eksperiment

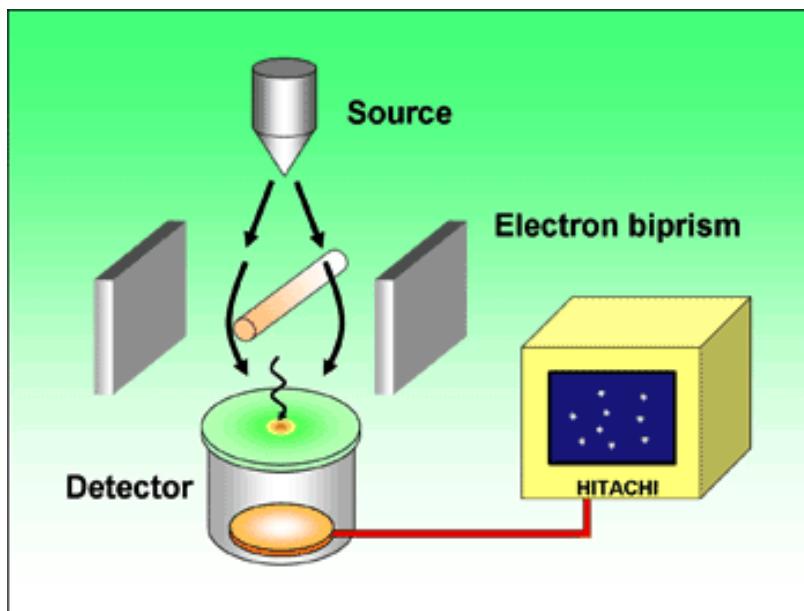
Kvantna teorija, koja je razvijena dvadesetih godina prošlog vijeka, je pokazala da fotoni, kao i druge subatomske čestice (npr. elektroni, protoni itd.), pokazuju dva komplementarna kvaliteta – oni su istovremeno i talasi i čestice. Neko je predložio kovanicu “wavicles” (od “wave” i “particle”) ali taj naziv nije usvojen (mi bismo ih mogli nazvati “talastice”). Francuski fizičar Louis de Broglie je prvi, 1924. godine, prepostavio da elektroni, koji su do tada bili smatrani samo česticama, imaju također i talasne osobine kao što su talasna dužina i frekvencija. 1927. godine talasnu prirodu elektrona su eksperimentalno demonstrirali C. J. Davisson i L. H. Germer u New Yorku i G. P. Thomson u Aberdeenu. Da bi objasnili talasnu prirodu elektrona, fizičari često koriste zamišljeni eksperiment u kojem se Youngov eksperiment sa interferencijom svjetlosti nakon prolaza kroz dvije pukotine ponavlja sa snopom elektrona umjesto svjetlosti. Prema zakonima kvantne mehanike talas koji odgovara svakoj od pojedinih čestica iz snopa čestica bi se podijelio na dva dijela koji bi međusobno interferirali stvarajući svijetle i tamne pruge slično kao i u eksperimentu sa svjetlosnim snopovima. Čestice bi se ponašale kao talasi. Takav eksperiment je zaista i izvršen znatno kasnije – 1961. godine ga je izveo Claus Jönsson u Tübingenu u Njemačkoj. Tada taj eksperiment nije predstavljao nikakvo iznenadenje i taj rad nije privukao veliku pažnju naučnika, iako on to svakako zasluzuje. Na donjoj slici su prikazane interferentna slika i prostorna raspodjela intenziteta elektrona koji su interferirali u tzv. “double-slit” eksperimentu.

Jedna novija eksperimentalna realizacija double-slit eksperimenta je predstavljena na slikama 1.14 i 1.15. Na slici 1.14 je prikazano kako se elektroni jedan po jedan emituju iz elektronskog mikroskopa koji služi kao izvor (engl. source). Elektroni prolaze kroz uređaj koji je nazvan elektronska biprizma (po analogiji sa eksperimentom interferencije svjetlosti nakon prolaska kroz staklenu biprizmu u optici). Taj uređaj se sastoji od dviju planparalelnih ploča i vlakna (engl. filament) u sredini. Prečnik vlakna je manji od $1\mu\text{m}$. Elektroni koji su prošli sa obadvije strane vlakna se detektuju jedan po jedan kao čestice na detektoru.

Na slici 1.15 je prikazan monitor na kojem su prikazani tragovi koje su ostavili elektroni na detektoru. U početku eksperimenta se mogu primijetiti male svijetle tačkice koje su raspoređene na slučajan način [slike 1.15(a) i 1.15(b)]. To su tragovi koje su pojedinačni elektroni ostavili na detektoru. Elektroni su detektovani jedan po jedan kao čestice. Očekujemo da će pruge interferencije nastati samo ako dva elektrona istovremeno prođu



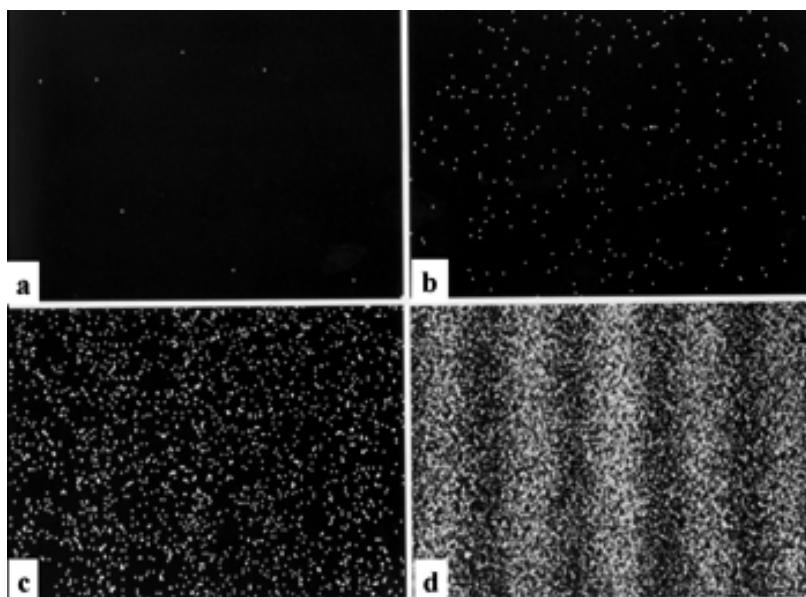
Slika 1.13: Interferentna slika i prostorna raspodjela intenziteta elektrona u double-slit eksperimentu.



Slika 1.14: Šema double-slit eksperimenta sa elektronskom biprizmom.

sa obadvije strane elektronske biprizme. Dakle, ako bi dva elektrona bila istovremeno emitovana iz elektronskog mikroskopa moglo bi doći do interferencije. Međutim, to se ne događa zato što se u eksperimentu emituje samo 10 elektrona u sekundi i elektroni se emituju jedan po jedan. Posmatra-

jmo eksperiment malo duže. Kada se akumulira veliki broj elektrona izgleda kao da se pojavljuje nešto nalik interferentnim prugama u smjeru ordinate na slici 1.15(c). Na slici 1.15(d) koja odgovara onome što se vidi nakon 20 minuta eksperimenta mogu se vidjeti jasne interferentne pruge. Treba naglasiti da su pruge sastavljene od svijetlih tačaka od kojih je svaka nastala detekcijom pojedinačnog elektrona. Dakle, došli smo do neobičnog zaključka. Iako se elektroni emituju jedan po jedan ipak možemo zapaziti pruge interferencije. Te pruge nastaju kada elektronski talasi istovremeno prolaze sa obadvije strane elektronske biprizme. Bitno je da se elektroni detektuju kao individualne čestice. Međutim, akumulacijom nastaju pruge interferencije. Također je bitno da se u jednom trenutku emituje najviše jedan elektron u mikroskopu. Ovi zaključci se kose sa našim uobičajenim spoznajama i zaključcima koji su bazirani na našim čulima i klasičnoj fizici.



Slika 1.15: Interferentna slika nastala akumuliranjem interferencije pojedinačnih elektrona u double-slit eksperimentu.

Dakle, jedan elektron se ponaša kao čestica, dok se akumuliranjem rezultata detekcije više pojedinačnih elektrona pojavljuje slika interferencije. Zato je pitanje interpretacije talasa koji opisuje česticu i njegove fizikalne realnosti bilo teme diskusije u prvima godinama razvoja kvantne mehanike.

Max Born (1882.-1970., Nobelova nagrada za fiziku mu je dodijeljena 1954. godine) je postavio osnove statističke interpretacije talasne funkcije koja opisuje česticu. U tu svrhu je uveo pojam *vodećeg polje* (eng. guiding field, njem. Führungsfeld). Ta ideja se povezuje i sa Einsteinom, koji je

koristio izraz ghostfield (eng. ghost - duh, field - polje, njem. Gespensterfeld). Vodeće polje je skalarna funkcija ψ koordinata svih čestica i vremena. Danas je za tu veličinu u literaturi uobičajen naziv *talasna funkcija* ili *psi-funkcija*. Prema osnovnoj ideji, kretanje čestice je određeno samo zakonima održanja energije i impulsa i graničnim uslovima koji zavise od tipa eksperimenta (odnosno eksperimentalnog uređaja). Čestica je održana unutar ovih postavljenih granica pomoću vodećeg polja. Vjerovatnoća da će čestica slijediti određenu putanju je određena kvadratom apsolutne vrijednosti vodećeg polja, tj. njegovim intenzitetom. U slučaju rasijanja elektrona ovo znači da intenzitet talasa materije (vodećeg polja) u datoj tački određuje vjerovatnoću nalaženja elektrona u toj tački. Sada ćemo dublje istražiti ovu interpretaciju talasa materije kao polja vjerovatnoća.

Definicija gustoće vjerovatnoće za čestice

Kvadrat amplitute talasne funkcije ψ je intenzitet. On bi trebao da odredi vjerovatnoću nalaženja čestice na određenom mjestu. Znajući da je vjerovatnoća uvijek realna, a da ψ može biti kompleksno, ne definišemo ψ^2 kao mjeru intenziteta, već

$$|\psi|^2 = \psi\psi^*, \quad (1.76)$$

gdje je ψ^* kompleksno konjugovana vrijednost talasne funkcije ψ . Pored toga, vjerovatnoća nalaženja čestice je proporcionalna veličini zapremine koja se posmatra. Neka je $dW(x, y, z, t)$ vjerovatnoća nalaženja čestice u određenom elementu zapremine $dV = dx dy dz$ u trenutku vremena t . Prema statističkoj interpretaciji talasa materije, uvedena je slijedeća hipoteza:

$$dW(x, y, z, t) = |\psi(x, y, z, t)|^2 dV. \quad (1.77)$$

Da bi se dobila veličina koja ne zavisi od zapremine, uvodimo *prostornu gustoću vjerovatnoće*:

$$dw(x, y, z, t) = \frac{dW}{dV} = |\psi(x, y, z, t)|^2. \quad (1.78)$$

Ona se normira na jedinicu, tj. amplituda talasne funkcije ψ je izabrana tako da je⁵

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi\psi^* dV = 1. \quad (1.79)$$

Smisao ove relacije je da čestica uvijek mora da se nalazi na nekom mjestu u prostoru. Integral normiranja je vremenski nezavisан $\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \psi\psi^* dV = \frac{d}{dt} 1 =$

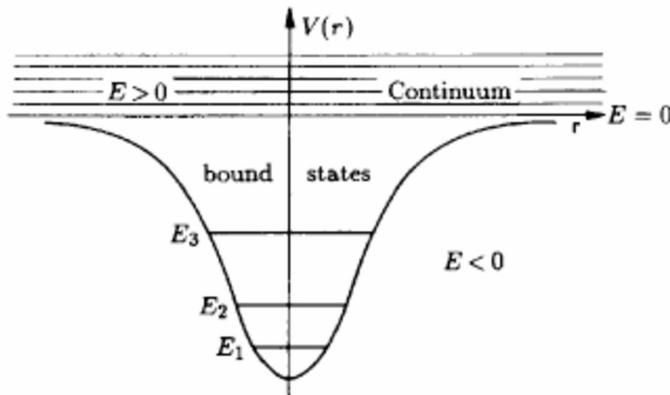
⁵Za trodimenzionalni prostor je $dV = dx dy dz$ i granice integriranja trodimenzionalnog integrala su $-\infty < x < \infty, -\infty < y < \infty, -\infty < z < \infty$.

0, jer se inače ne bi moglo upoređivati vjerovatnoće koje se odnose na različita vremena. Talasna funkcija ψ može biti normirana ako je kvadratično-integrabilna, tj. ako nesvojstveni integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dV \text{ konvergira, tj. } \int_{-\infty}^{\infty} \psi \psi^* dV < M, \quad (1.80)$$

gdje je M realna konstanta. Interpretacija vjerovatnoće za polje ψ opisana relacijom (1.77) je još uvijek samo hipoteza i njena validnost se mora dokazati. Ona će biti dokazana, kao što ćemo vidjeti, uspjehom rezultata koje predviđa.

Napomenimo da je normirana talasna funkcija ψ određena samo do na fazni faktor čiji je modul jednak jedinici, tj. do faktora $e^{i\alpha}$ sa proizvoljnim realnim brojem α . Ovaj nedostatak jedinstvenosti potiče od činjenice da samo veličina $\psi\psi^* = |\psi|^2$, gustoća vjerovatnoće, ima fizikalnu interpretaciju.



Slika 1.16: Vezano stanje i stanje kontinuum čestice u potencijalnoj jami.

Vezana i slobodna stanja

Kažemo da je stanje *vezano* (ograničeno), ako je kretanje sistema ograničeno. Ako to kretanje nije ograničeno, onda imamo *slobodna* stanja. U toku ovoga kursa ćemo ustanoviti sljedeće činjenice: talasna funkcija ψ za vezana stanja ($E < 0$) je kvadratično-integrabilna, dok $|\psi|^2$ nije integrabilno za slobodna stanja. Ovo je intuitivno razumljivo na osnovu slike 1.16: vezana (engl. bound) stanja su lokalizovana unutar potencijalne jame i mogu se kretati samo u njenoj unutrašnjosti, dok slobodna stanja nemaju takva ograničenja i odgovarajuće koordinate mogu poprimati neprekidne (kontinuirane) vrijednosti (engl. continuum).

Normiranje u kocki i relacija ortonormiranosti

Primjer talasne funkcije koja ne može biti normirana u skladu sa zahtjevom (1.80) je talasna funkcija

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ne^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (1.81)$$

gdje je N realna konstanta. Ovaj ravni talas opisuje kretanje slobodne čestice sa impulsom $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ i neodređenim lokalitetom. Pokazuje se da možemo normirati funkciju (1.81) ako definišemo sve funkcije unutar kocke ograničene zapremine sa stranicom dužine L [to je tzv. *normiranje u kocki* ili normiranje u kutiji (eng. box)]:

$$\psi = \begin{cases} Ne^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} & \text{za } \mathbf{r} \text{ unutar } V = L^3 \\ 0 & \text{za } \mathbf{r} \text{ izvan } V = L^3 \end{cases}. \quad (1.82)$$

Druga metoda za normiranje takvih “kontinuumskih talasnih funkcija” će biti predstavljena u poglavlju 5.

Na površini te kocke talasna funkcija mora zadovoljavati određene granične uslove. Prepostavljamo da je L veliko u odnosu na mikroskopske standarde ($L \gg 10^{-8}$ m). Tada je uticaj graničnih uslova na kretanje čestice u zapremini $V = L^3$ veoma mali, tako da možemo izabrati granične uslove na jednostavan način. Vrlo često se za granične uslove bira periodičnost sa periodom L : zahtjevamo da je

$$\psi(x, y, z) = \psi(x + L, y, z) = \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z + L). \quad (1.83)$$

Faktor normiranja N u (1.81), ćemo odrediti imajući u vidu definiciju (1.82). Dobijamo $1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi\psi^* dV = N^2 \int_{V=L^3} dV = N^2 L^3$, odakle slijedi da je: $N = 1/\sqrt{L^3} = 1/\sqrt{V}$. Tako smo dobili normiranu talasnu funkciju:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega(k)t} = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\omega(k)t}, \quad \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (1.84)$$

Granični uslovi našeg problema ograničavaju broj mogućih vrijednosti vektora \mathbf{k} :

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n}, \quad \mathbf{k} = \{k_x, k_y, k_z\}, \quad \mathbf{n} = \{n_x, n_y, n_z\}, \quad (1.85a)$$

odnosno, napisano preko komponenti, imamo da je:

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z, \quad (1.85b)$$

gdje su n_x, n_y i n_z cijeli brojevi. Dakle, impuls $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} = (2\pi\hbar/L)\mathbf{n}$ je kvantiziran. Isto vrijedi i za energiju $E = \hbar\omega(k)$ i za frekvenciju talasa:

$$\omega(k) = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2\hbar m} = \frac{\hbar k^2}{2m} = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \frac{\hbar}{2m} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \quad (1.86)$$

Uvrštavajući vrijednosti \mathbf{k} u normiranu talasnu jednačinu (1.84) dobijamo:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = V^{-1/2} \exp\{i[(2\pi/L)\mathbf{n} \cdot \mathbf{r} - \omega(k)t]\} = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{-i\omega(k)t}. \quad (1.87)$$

Za ove talasne funkcije možemo eksplicitno provjeriti da su uslovi periodičnosti (1.83) ispunjeni. Zahvaljujući graničnim uslovima (1.83) vektor \mathbf{k} i impuls $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ poprimaju diskretne vrijednosti koje su date uslovima (1.85). U limesu $L \rightarrow \infty$ razlike između susjednih vrijednosti \mathbf{k} teže ka nuli, tako da se ustvari tu radi o kretanju slobodne čestice u beskonačnom prostoru.

Sada ćemo dokazati da talasne funkcije $\psi_{\mathbf{k}}$ čine ortonormirani sistem funkcija, tj. da vrijedi *relacija ortonormiranosti*:

$$\int_V \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})dV = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (1.88)$$

Ovdje razmatramo samo prostorni dio talasne funkcije $\psi_{\mathbf{k}}$ [ravni talas (1.84)]. Faktor koji zavisi od vremena preko člana $\exp(-i\omega t)$ ne mijenja ništa u relaciji ortonormiranosti (1.88). Uvrštavanjem (1.84) u izraz na lijevoj strani (1.88) dobijamo:

$$\begin{aligned} & \int_{V=L^3} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})dV = \\ &= \frac{1}{L^3} \int_{-L/2}^{L/2} e^{i(k_x-k'_x)x} dx \int_{-L/2}^{L/2} e^{i(k_y-k'_y)y} dy \int_{-L/2}^{L/2} e^{i(k_z-k'_z)z} dz \\ &= \frac{1}{L^3} \int_{-L/2}^{L/2} e^{i\frac{2\pi}{L}(n_x-n'_x)x} dx \int_{-L/2}^{L/2} e^{i\frac{2\pi}{L}(n_y-n'_y)y} dy \int_{-L/2}^{L/2} e^{i\frac{2\pi}{L}(n_z-n'_z)z} dz \\ &= \frac{\sin(\pi(n_x - n'_x))}{\pi(n_x - n'_x)} \frac{\sin(\pi(n_y - n'_y))}{\pi(n_y - n'_y)} \frac{\sin(\pi(n_z - n'_z))}{\pi(n_z - n'_z)}. \end{aligned} \quad (1.89)$$

Očito je $\sin(\pi(n_x - n'_x)) = 0$ za $n_x \neq n'_x$ i $\sin(\pi(n_x - n'_x))/\pi(n_x - n'_x) = 1$ za $n_x = n'_x$. Analognе relacije vrijede i za y i z komponente, tako da je (1.89) jednako $\delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, čime je dokazana relacija (1.88).

Relacija kompletnosti i ortonormirana baza u Hilbertovom prostoru

Funkcije $\psi_{\mathbf{k}}$ čine kompletan sistem funkcija, tj. nije moguće naći još jednu funkciju ϕ takvu da je ortogonalna na sve $\psi_{\mathbf{k}}$ u smislu relacije (1.88). Tada vrijedi slijedeća *relacija kompletnosti*:

$$\int_V \psi \psi^* dV = \int_V |\psi|^2 dV = \sum_k |a_{\mathbf{k}}|^2, \quad (1.90)$$

gdje su $a_{\mathbf{k}}$ koeficijenti razvoja proizvoljne talasne funkcije ψ po kompletnom skupu funkcija $\psi_{\mathbf{k}}$

$$\psi = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}. \quad (1.91)$$

Ako vrijedi relacija kompletnosti (1.90) (dokaz je ovdje ispušten), možemo uvjek razviti funkciju ψ koristeći relaciju (1.91), tj. funkcije $\psi_{\mathbf{k}}$ čine ortonormiranu bazu u *Hilbertovom prostoru*. Hilbertov prostor je ograničen ili neograničen vektorski prostor definisan nad poljem kompleksnih brojeva. U ovom prostoru skalarni proizvod se definiše tako da je svakom paru funkcija ψ i ϕ iz skupa linearnih funkcija pridružen kompleksan broj. Za skalarni proizvod vrijede slijedeće relacije:

$$\begin{aligned} (1) \quad \langle \psi | \phi \rangle &= \int \psi^* \phi dV = \left(\int \phi^* \psi dV \right)^* = (\langle \phi | \psi \rangle)^*, \\ (2) \quad \langle \psi | a\phi_1 + b\phi_2 \rangle &= a\langle \psi | \phi_1 \rangle + b\langle \psi | \phi_2 \rangle \quad \text{ili} \\ &\int \psi^* (a\phi_1 + b\phi_2) dV = a \int \psi^* \phi_1 dV + b \int \psi^* \phi_2 dV \quad (\text{linearnost}), \\ (3) \quad \langle \psi | \psi \rangle &= \int \psi^* \psi dV \geq 0, \\ (4) \quad \text{iz } \langle \psi | \psi \rangle &= \int \psi^* \psi dV = 0 \quad \text{slijedi da je } \psi = 0. \end{aligned} \quad (1.92)$$

Vektori stanja (= talasne funkcije) kvantno-mehaničkog sistema čine Hilbertov prostor (dakle, Hilbertov prostor je prostor funkcija). Pokažimo sada da (1.91) vodi na relaciju kompletnosti (1.90). Množenjem obadviju strana jednačine (1.91) sa konjugovano kompleksnom funkcijom ψ^* , integrirajući po cijelom prostoru i koristeći uslov ortonormiranosti (1.88) dobijamo da je

$$\begin{aligned} \int_V \psi \psi^* dV &= \int_V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'}^* \psi_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}'}^* dV = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'}^* \int_V \psi_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}'}^* dV \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'}^* \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}} |a_{\mathbf{k}}|^2, \end{aligned} \quad (1.93)$$

što je upravo relacija kompletnosti (1.90).

Da bismo odredili koeficijente $a_{\mathbf{k}}$ pomnožimo jednačinu (1.91) sa $\psi_{\mathbf{k}}^*$ i integrirajmo po cijeloj zapremini V . Dobijamo:

$$\int_V \psi \psi_{\mathbf{k}}^* dV = \sum_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'} \int_V \psi_{\mathbf{k}'} \psi_{\mathbf{k}}^* dV = \sum_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = a_{\mathbf{k}}. \quad (1.94)$$

Pošto su talasne funkcije normirane na jedinicu, to je $1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi \psi^* dV = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'}^* \int_V \psi_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}'}^* dV = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'}^* \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^*$, tako da je

$$\sum_{\mathbf{k}} |a_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (1.95)$$

Veličinu $|a_{\mathbf{k}}|^2$ interpretiramo kao vjerovatnoću nalaženja čestice sa impulsom $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ u stanju ψ . Ova interpretacija je u skladu sa jednačinom (1.91) i sa činjenicom da su funkcije $\psi_{\mathbf{k}}$ talasne funkcije sa određenim impulsom $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$.

1.3.4 Srednje (očekivane) vrijednosti u kvantnoj mehanici

U dalnjem tekstu izračunat ćemo srednju vrijednost položaja, impulsa i drugih fizikalnih veličina u određenim stanjima, uz prepostavku da nam je poznata normirana talasna funkcija ψ .

1. Srednja očekivana vrijednost koordinate položaja. Neka je kvantnomehanički sistem u stanju ψ . Gustoća vjerovatnoće položaja je data sa $\psi \psi^*$. Funkcija stanja ψ je normirana na jedinicu. Srednja vrijednost vektora položaja je data sa:

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int_V \mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) dV = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) dV, \quad (1.96)$$

a srednja vrijednost funkcije $f(\mathbf{r})$, koja zavisi samo od \mathbf{r} , je

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = \int_V f(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) dV = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) dV. \quad (1.97)$$

2. Srednja vrijednost (linearnog) impulsa. Već smo pokazali da se proizvoljna talasna funkcija ψ može razviti po ortonormiranoj bazi Hilbertovog prostora $\{\psi_{\mathbf{k}}\}$. Uzimajući u obzir da kvadrat apsolutne vrijednosti koeficijenta razvoja $a_{\mathbf{k}}$ predstavlja vjerovatnoću da čestica ima impuls $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, možemo pisati da je srednja vrijednost impulsa:

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* (\hbar \mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}. \quad (1.98)$$

Uvrštavanjem $a_{\mathbf{k}}$ iz izraza (1.94) u gornju relaciju za očekivanu vrijednost impulsa, slijedi da je:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p} \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} \left(\int_{V'} \psi(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') dV' \right)^* \hbar \mathbf{k} \left(\int_V \psi(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) dV \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \int_V \int_{V'} \psi^*(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \hbar \mathbf{k} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) dV dV'.\end{aligned}\quad (1.99)$$

Pošto je $\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})/\sqrt{V}$, to je

$$\hbar \mathbf{k} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = i\hbar \nabla \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}), \quad \nabla \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{y} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{z}, \quad (1.100)$$

tako da je

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \int_{V'} \psi^*(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') dV' \int_V [i\hbar \nabla \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})] \psi(\mathbf{r}) dV. \quad (1.101)$$

Parcijalnom integracijom može se djelovanje operatora ∇ prebaciti sa $\psi_{\mathbf{k}}^*$ na ψ . Npr. za x komponentu vrijedi:

$$\int \int \left[\int \left(\frac{d\psi_{\mathbf{k}}^*}{dx} \right) \psi dx \right] dy dz = \int \int \psi_{\mathbf{k}}^* \psi \Big|_{x=0,L} dy dz - \int \psi_{\mathbf{k}}^* \left(\frac{d\psi}{dx} \right) dV,$$

Funkcije ψ i $\psi_{\mathbf{k}}^*$ na nasuprotnim ravnima $x = 0$ i $x = L$ poprimaju iste vrijednosti zbog uslova periodičnosti (1.83), tako da je prvi član na desnoj strani u gornjoj relaciji jednak nuli. Dakle, očekivana vrijednost impulsa \mathbf{p} je data sa

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int_V \int_{V'} \left\{ \psi^*(\mathbf{r}') [-i\hbar \nabla \psi(\mathbf{r})] \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \right\} dV dV'. \quad (1.102)$$

Sada ćemo iskoristiti relaciju

$$\sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}), \quad (1.103)$$

koja se lako može dokazati razvojem delta funkcije $\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ po kompletном skupu funkcija $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$: $\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$ i računajući koeficijente razvoja $b_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')$. Množeći obadvije strane ovoga razvoja sa $\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$ i integrirajući po dV dobijamo: $\int_V \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) dV = \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \int_V \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) dV$, tako da, uz pomoć osobina delta funkcije i relacije ortonormiranosti (1.88), slijedi da je: $\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = b_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}')$, što odmah daje relaciju (1.103).

Primjenjujući relaciju (1.103), jednačina (1.102) se može napisati u slijedećem obliku, čija je struktura slična formuli za srednju vrijednost vektora položaja:

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int_{V=L^3} \psi^*(\mathbf{r}) (-i\hbar \nabla) \psi(\mathbf{r}) dV. \quad (1.104)$$

Ova relacija nam omogućava da izračunamo srednju vrijednost impulsa ako nam je poznata talasna funkcija $\psi(\mathbf{r})$ za odgovarajuće stanje. Struktura jednačine (1.103) ostaje validna i u limesu $L \rightarrow \infty$. Na sličan način možemo zaključiti da je srednja vrijednost za proizvoljan stepen impulsa jednaka

$$\langle \mathbf{p}^\nu \rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) (-i\hbar \nabla)^\nu \psi(\mathbf{r}) dV. \quad (1.105)$$

Ovaj rezultat možemo poopštiti za proizvoljnu funkciju $F(\mathbf{p}) = \sum_\nu a_\nu \mathbf{p}^\nu$

$$\langle F(\mathbf{p}) \rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) \hat{F}(-i\hbar \nabla) \psi(\mathbf{r}) dV. \quad (1.106)$$

Ovdje je \hat{F} operator. Dakle impuls \mathbf{p} je povezan sa *diferencijalnim operatorom* $-i\hbar \nabla$ i vrijedi

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla, \quad \hat{F}(\mathbf{p}) = \sum_\nu a_\nu \hat{\mathbf{p}}^\nu. \quad (1.107)$$

Važnost ove relacije leži u činjenici da, ako želimo da izračunamo očekivanu vrijednost veličine $F(\mathbf{p})$, ne treba da se koristimo Fourierovim razvojem talasne funkcije $\psi(\mathbf{r})$ i računamo $\langle F(\mathbf{p}) \rangle = \sum_{\mathbf{k}} F(\hbar \mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}$, kao što smo to radili kada smo računali srednju vrijednost impulsa $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$. Čitavo izvođenje se može skratiti uvođenjem operatora $\hat{F}(\hat{\mathbf{p}})$ umjesto funkcije $F(\mathbf{p})$ i direktno integrirajući relaciju (1.106). U narednom odjeljku ćemo primijeniti ove relacije na tri operatora koja su od posebnog značaja za kvantnu mehaniku.

1.3.5 Primjer tri kvantno-mehanička operatora

1. Operator kinetičke energije. U nerelativističkom slučaju imamo da je kinetička energija $T = \mathbf{p}^2/(2m)$. Uvezši u obzir da je $\nabla^2 \equiv \Delta$ operator \hat{T} dobijamo

$$\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = \frac{(-i\hbar \nabla)^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta, \quad (1.108)$$

što je specijalni slučaj relacije (1.105), odnosno (1.106).

2. Operator momenta impulsa. Uzimajući u obzir da je klasični moment impulsa (ugaoni moment) čestice $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, za kvantno-mehanički operator momenta impulsa dobijamo:

$$\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times (-i\hbar \nabla) = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla. \quad (1.109)$$

Individualne komponente ovoga operatora su

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), & \hat{L}_y &= -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).\end{aligned}\quad (1.110)$$

3. Hamiltonov operator (hamiltonijan). Totalna energija vremenski nezavisnog fizikalnog sistema je u klasičnoj mehanici opisana Hamiltonovom funkcijom $H = T + V(\mathbf{r})$, gdje $V(\mathbf{r})$ označava potencijalnu energiju. Iz ove relacije slijedi da je Hamiltonov operator (hamiltonijan)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{V}(\mathbf{r}).\quad (1.111)$$

U kvantnoj mehanici, svakoj opservabilnoj veličini A je pripisan operator \hat{A} : $A \rightarrow \hat{A}$. Neka je $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ proizvoljna funkcija od \mathbf{r} i \mathbf{p} . Operator koji odgovara toj funkciji se formira zamjenom veličina \mathbf{r} i \mathbf{p} odgovarajućim operatorima $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$ i $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ u izrazu za $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Ovdje je operator položaja identičan vektoru položaja. Treba napomenuti da ova zamjena vrijedi samo u koordinatnoj reprezentaciji, pro čemu se koriste Descartesove pravougle koordinate (x, y, z) .

1.3.6 Princip superpozicije u kvantnoj mehanici

Jedan od osnovnih principa u kvantnoj mehanici je princip linearne superpozicije stanja ili, kraće, *princip superpozicije*. On kaže da ako se kvantno-mehanički sistem može nalaziti u diskretnim stanjima ψ_n , $n \in \mathbb{N}$ (prirodan broj), tada taj sistem može da bude i u stanju

$$\psi = \sum_n a_n \psi_n.\quad (1.112)$$

Odgovarajuća gustoća vjerovatnoće je data sa

$$w = \psi\psi^* = \sum_{n,m} a_n a_m^* \psi_n \psi_m^*.\quad (1.113)$$

Ove fizikalne okolnosti odgovaraju matematičkoj činjenici da svaka moguća talasna funkcija ψ može biti razvijena po ortogonalnom, potpunom skupu funkcija ψ_n . Ovu činjenicu smo iskoristili u (1.91).

Ako kvantno-mehanički sistem može da bude u nizu stanja φ_f , okarakterisanih proizvoljnom fizikalnom veličinom f , stanje

$$\psi = \int c_f \varphi_f df\quad (1.114)$$

gdje su c_f proizvoljni kompleksni koeficijenti (brojevi), se također može realizovati.

Talasna jednačina za funkciju ψ mora biti linearna diferencijalna jednačina. Princip superpozicije može biti zadovoljen samo na slijedeći način: ako su ψ_n rješenja fundamentalne linearne jednačine, tada će, zbog linearnosti jednačine, linearna kombinacija tipa (1.113) ili (1.114) također biti njezino rješenje.

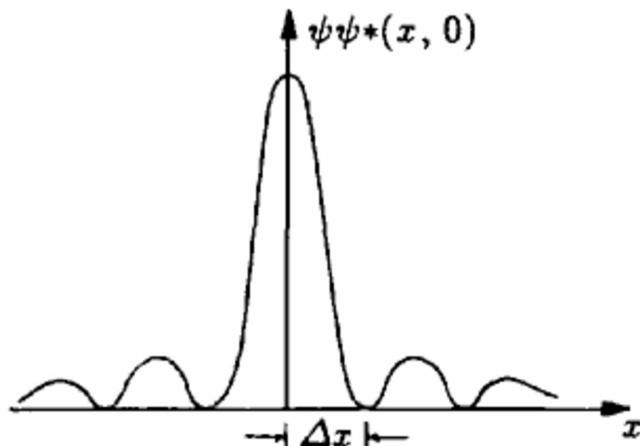
1.3.7 Heisenbergov princip neodređenosti

Talasni karakter materije, tj. to da su u kvantnoj mehanici čestice opisane talasnom funkcijom (“vođene poljem”) $\psi(x, t)$ manifestuje se i u činjenici da u mikroskopskoj fizici postoji direktna veza između određivanja položaja i impulsa, tj. da nismo u stanju istovremeno tačno mjeriti položaj i impuls čestice. Stepen neodređenosti je dat *Heisenbergovim principom neodređenosti*.

Pokažimo prvo postojanje te neodređenosti. Razmotrimo jednodimenzionalni talasni paket, čija je talasna funkcija data formulom:

$$\psi(x, t) = 2c(k_0) \frac{\sin [\Delta k(v_g t - x)]}{v_g t - x} e^{i(\omega_0 t - k_0 x)}. \quad (1.115)$$

U trenutku $t = 0$ taj talasni paket je prikazan na slici 1.17. Širenje grupe



Slika 1.17: Gestoča vjerovatnoće talasnog paketa (1.115) u trenutku $t = 0$.

talasa može biti okarakterisano rastojanjem Δx između glavnog maksimuma i prvog minimuma. Uslov minimuma je $|\psi(x, 0)|^2 = 4c^2 \sin^2(\Delta k x)/x^2 = 0$, tako da za prvi minimum $x = \Delta x$ dobijamo $\Delta k \Delta x = \pi$. Dakle, dobili

smo slijedeću aproksimaciju za Heisenbergovu relaciju neodređenosti između položaja i impulsa:

$$\Delta p \Delta x \approx \pi \hbar. \quad (1.116)$$

Ovo znači da istovremeno određivanje položaja i impulsa u mikroskopskoj fizici nije moguće sa proizvoljnom tačnošću jer su te veličine uvijek povezane gornjom relacijom.

Heisenbergov princip neodređenosti je posljedica talasnog karaktera čestice (vodećeg polja čestice). Prema principu superpozicije talasni paket je superpozicija ravnih talasa sa određenim impulsom. Čestica vođena ovim talasnim paketom može se sa velikom vjerovatnoćom naći unutar intervala Δx . Kaže se da je čestica *lokalizovana* unutar Δx . Za takvu lokalizaciju je potreban veliki broj ravnih talasa sa impulsom blizu $\hbar k_0$, tj. talasni paket širine $\hbar \Delta k$.

Nakon ovoga ilustrativnog razmatranja, izvedimo Heisenbergov princip neodređenosti u egzaktnom obliku. Naša polazna tačka je proizvoljno stanje čestice opisano talasnom funkcijom $\psi(x)$. Pretpostavimo da je ψ normirana na jedinicu i ograničimo se za sada na samo jednu dimenziju.

Da bismo izveli princip neodređenosti prvo moramo odrediti mjeru za neodređenost, tj. moramo definisati mjeru za odstupanje (devijaciju) p_x i x od određenih srednjih vrijednosti

$$\overline{p_x} = \int \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx, \quad \overline{x} = \int \psi^*(x) x \psi(x) dx. \quad (1.117)$$

Ovdje koristimo srednje kvadratne devijacije (disperzije) $\overline{\Delta p_x^2}$ i $\overline{\Delta x^2}$, koje su definisane ako

$$\overline{\Delta p_x^2} = \overline{(p_x - \overline{p}_x)^2} = \overline{p_x^2} - \overline{p}_x^2, \quad \overline{\Delta x^2} = \overline{(x - \overline{x})^2} = \overline{x^2} - \overline{x}^2. \quad (1.118)$$

Za daljnje izvođenje pretpostavljamo da je ishodište fiksirano u tački \overline{x} i da se kreće sa centrom raspodjele \overline{x} na takav način da u bilo kojem trenutku važi da je $\overline{x} = 0$. Tada imamo $\overline{x} = 0$ i $\overline{p_x} = 0$. Iz relacija za srednje kvadratne devijacije (1.118) dobijamo

$$\overline{\Delta x^2} = \overline{x^2}, \quad \overline{\Delta p_x^2} = \overline{p_x^2}, \quad (1.119)$$

gdje su srednje vrijednosti kvadrata koordinate i kvadrata impulsa

$$\begin{aligned} \overline{x^2} &= \int \psi^* x^2 \psi dx, \\ \overline{p_x^2} &= \int \psi^* \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi dx = -\hbar^2 \int \psi^* \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx. \end{aligned} \quad (1.120)$$

Da bismo ustanovili vezu između veličina $\overline{x^2}$ i $\overline{p_x^2}$, razmatramo integral

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \alpha x \psi(x) + \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 dx, \quad \alpha \in \mathbb{R}. \quad (1.121)$$

Podintegralna funkcija je apsolutni kvadrat, tako da je $I(\alpha) \geq 0$, α realan broj. Nakon množenja dobijamo

$$I(\alpha) = A\alpha^2 + B\alpha + C, \quad (1.122)$$

gdje smo uveli slijedeće skraćene oznake:

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi|^2 dx = \overline{\Delta x^2}, \quad (1.123a)$$

$$\begin{aligned} B &= \int_{-\infty}^{\infty} x \left(\frac{d\psi^*}{dx} \psi + \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{d}{dx} (\psi^* \psi) dx \\ &= x \psi^* \psi \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = -1, \end{aligned} \quad (1.123b)$$

$$\begin{aligned} C &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx} dx = \psi^* \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} dx \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \psi \right) dx = \frac{1}{\hbar^2} \overline{\Delta p_x^2}. \end{aligned} \quad (1.123c)$$

Pri izvođenju relacija (1.123b) i (1.123c) smo iskoristili to da funkcije ψ i $d\psi/dx$ iščezavaju na granicama oblasti integriranja. Pošto je polinom $I(\alpha)$ drugog stepena po α i pozitivno definitan, diskriminanta $D = B^2 - 4AC$ mora obavezno biti negativna ili nula. To se može vidjeti i tako da se integral (1.122) napiše u obliku

$$I(\alpha) = A \left(\alpha + \frac{B}{2A} \right)^2 - \frac{D}{2A} \geq 0. \quad (1.124)$$

$I(\alpha)$ mora biti pozitivno za svako α , pa i za $\alpha = -B/(2A)$. Prema tome, vrijedi relacija $B^2 - 4AC \leq 0$, tako da korjeni kvadratne jednačine $I(\alpha) = 0$ moraju biti kompleksni. Uvrštavajući u ovu nejednakost vrijednost za A , B i C iz (1.123), dobijamo relaciju neodređenosti za impuls i položaj u obliku

$$\overline{(\Delta p_x)^2} \overline{(\Delta x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (1.125)$$

Eksperimentalna potvrda talasne prirode čestica (tj. postojanje vodećeg polja) očito implicira da impuls i koordinata čestice ne mogu istovremeno biti određeni; ove observable nikada ne mogu biti mjerene istovremeno sa proizvoljnom preciznošću. U narednom poglavlju ćemo vidjeti da ovaj princip vrijedi i za druge parove fizikalnih veličina, pod uslovom da proizvod njihovih dimenzija ima dimenziju akcije.

1.3.8 Zadaci

Zadatak 1.3.1. Izračunati očekivanu (srednju) vrijednost kinetičke energije $\hat{T} = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m)$, gdje je $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, $m = m_e$ masa elektrona, i potencijalne energije $\hat{V}(r) = -e^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$ za $1s$ -elektron u osnovnom stanju atoma vodonika sa talasnom funkcijom:

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}, \quad a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}. \quad (1.126)$$

Rješenje: Očekivana vrijednost se definiše kao:

$$\langle \hat{T} \rangle = \int d^3r \psi_{1s}^*(\mathbf{r}) \hat{T} \psi_{1s}(\mathbf{r}), \quad \langle \hat{V} \rangle = \int d^3r \psi_{1s}^*(\mathbf{r}) \hat{V} \psi_{1s}(\mathbf{r}). \quad (1.127)$$

Koristit ćemo sferne koordinate za koje vrijedi:

$$\int d^3r f(r) = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta f(r) = 4\pi \int_0^\infty dr r^2 f(r). \quad (1.128)$$

Također, vrijedi relacija

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = (-i\hbar\nabla)^2 = -\hbar^2 \Delta = -\hbar^2 \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta,\varphi} \right], \quad (1.129)$$

gdje je:

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} = \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}, \quad (1.130)$$

što u našem slučaju daje $\Delta_{\theta,\varphi}\psi_{1s} = 0$, tako da je:

$$\begin{aligned} \Delta\psi_{1s} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r\psi_{1s}) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\psi_{1s} + r \frac{\partial\psi_{1s}}{\partial r} \right) \\ &= \frac{2}{r} \frac{\partial\psi_{1s}}{\partial r} + \frac{\partial^2\psi_{1s}}{\partial r^2} = -\frac{1}{a} \left(\frac{2}{r} - \frac{1}{a} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}. \end{aligned} \quad (1.131)$$

Na osnovu ovog rezultata i relacije:

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}, \quad n > 0, \quad (1.132)$$

dobijamo:

$$\begin{aligned} \langle \hat{T} \rangle &= \int d^3r \psi_{1s}^*(\mathbf{r}) \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \psi_{1s}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\pi a^3} 4\pi \int_0^\infty r^2 dr e^{-\frac{r}{a}} \left[-\frac{1}{a} \left(\frac{2}{r} - \frac{1}{a} \right) \right] e^{-\frac{r}{a}} \\ &= \frac{2\hbar^2}{ma^4} \int_0^\infty dr \left(2r - \frac{r^2}{a} \right) e^{-\frac{2r}{a}} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \end{aligned} \quad (1.133)$$

Za očekivanu vrijednost potencijalne energije dobija se:

$$\langle \hat{V} \rangle = \frac{4\pi}{\pi a^3} \int_0^\infty r^2 dr e^{-\frac{r}{a}} \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) e^{-\frac{r}{a}} = -\frac{4e^2}{4\pi\epsilon_0 a^3} \int_0^\infty dr r e^{-\frac{2r}{a}} = -\frac{\hbar^2}{ma^2}. \quad (1.134)$$

Totalna energija je: $E = \langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{V} \rangle = -\hbar^2/(2ma^2)$, a to je upravo energija veze elektrona u osnovnom stanju vodonikovog atoma.

Zadatak 1.3.2. Odrediti faktor normiranja N za de Broglieve talase:

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = N \exp [i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar], \quad (1.135)$$

pod uslovom da se normiranje vrši na delta funkciju.

Razviti funkciju proizvoljnog stanja $\psi(\mathbf{r}, t)$ po de Broglievim talasima i objasniti fizikalni smisao koeficijenata razvoja.

Rješenje: Treba naći N iz uslova

$$I = \int \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)^* \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (1.136)$$

Vrijedi:

$$I = N^2 \int d\mathbf{r} \exp [-i(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}/\hbar] = N^2 \lim_{g \rightarrow \infty} I_x(g) I_y(g) I_z(g), \quad (1.137)$$

gdje je

$$I_x(g) = \int_{-g}^g dx \exp [-i(p_x - p'_x)x/\hbar] = 2 \frac{\sin[g(p_x - p'_x)/\hbar]}{(p_x - p'_x)/\hbar}. \quad (1.138)$$

Analogne relacije vrijede za $I_y(g)$ i $I_z(g)$. Pošto je

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{g \rightarrow \infty} \frac{\sin(gx)}{x}, \quad (1.139)$$

to za integral I dobijamo:

$$I = N^2 2\pi \delta\left(\frac{p_x - p'_x}{\hbar}\right) 2\pi \delta\left(\frac{p_y - p'_y}{\hbar}\right) 2\pi \delta\left(\frac{p_z - p'_z}{\hbar}\right) = N^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (1.140)$$

pri čemu smo koristili relacije:

$$\delta\left(\frac{\mathbf{p} - \mathbf{p}'}{\hbar^3}\right) = \delta\left(\frac{p_x - p'_x}{\hbar}\right) \delta\left(\frac{p_y - p'_y}{\hbar}\right) \delta\left(\frac{p_z - p'_z}{\hbar}\right), \quad \delta(ax) = \frac{1}{a} \delta(x). \quad (1.141)$$

Poredeći (1.136) i (1.140) dobijamo traženi faktor normiranja:

$$N = (2\pi\hbar)^{-3/2}. \quad (1.142)$$

Razvoj talasne funkcije proizvoljnog stanja $\psi(\mathbf{r}, t)$ po de Broglievim talasima glasi:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int c(\mathbf{p}, t)\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)d^3p, \quad (1.143)$$

gdje su $c(\mathbf{p}, t)$ koeficijenti razvoja koji odgovaraju amplitudama sa kojima su pojedina stanja predstavljena de Broglievim talasima sadržana u stanju $\psi(\mathbf{r}, t)$. Pokažimo da je sa (1.143) data faktorizacija funkcije $\psi(\mathbf{r}, t)$ u trostruki Fourierov integral. Fourierova formula glasi:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = (2\pi)^{-3} \int \varphi(\mathbf{p}, t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d^3k, \quad (1.144)$$

gdje je $\varphi(\mathbf{p}, t)$ Fourier transformat talasne funkcije $\psi(\mathbf{r}, t)$. Uvrštavajući $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ u (1.144) dobijamo:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = (2\pi)^{-3} \int \varphi(\mathbf{p}, t) \exp\left(i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right) \frac{d^3p}{\hbar^3}. \quad (1.145)$$

Iz definicije Fourierovog transformata za $\varphi(\mathbf{p}, t)$ se dobija:

$$\varphi(\mathbf{p}, t) = \int \psi(\mathbf{r}, t) \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar) d^3r. \quad (1.146)$$

Poređenjem (1.143) i (1.145), uz korištenje relacija (1.135) i (1.142), nalazimo da je:

$$\varphi(\mathbf{p}, t) = (2\pi\hbar)^{3-\frac{3}{2}} c(\mathbf{p}, t) \exp(-iEt/\hbar) = (2\pi\hbar)^{3/2} c(\mathbf{p}, t) \exp(-iEt/\hbar). \quad (1.147)$$

Za koeficijente razvoja vrijedi relacija:

$$\begin{aligned} \int |c(\mathbf{p}, t)|^2 d\mathbf{p} &= (2\pi\hbar)^{-3} \int |\varphi(\mathbf{p}, t)|^2 d^3p \\ &= (2\pi\hbar)^{-3} \int \int \int d\mathbf{p} dr dr' \exp[-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')/\hbar] \psi^*(\mathbf{r}', t) \psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \int \int d\mathbf{r} dr' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi^*(\mathbf{r}', t) \psi(\mathbf{r}, t) = \int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = 1. \end{aligned} \quad (1.148)$$

Prema tome, vjerovatnoća nalaženja impulsa u intervalima $(p_x, p_x + dp_x)$, $(p_y, p_y + dp_y)$, $(p_z, p_z + dp_z)$ je određena koeficijentima razvoja $c(\mathbf{p}, t)$. Tako se za vjerovatnoću može pisati:

$$dW(\mathbf{p}, t) = |c(\mathbf{p}, t)|^2 d\mathbf{p}, \quad (1.149)$$

dok je gustoća vjerovatnoće u impulsnom prostoru

$$w(\mathbf{p}, t) = |c(\mathbf{p}, t)|^2. \quad (1.150)$$

Zadatak 1.3.3. Neka je Gaussov talasni paket u trenutku $t = 0$ opisan pomoću talasne funkcije

$$\psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0x\right). \quad (1.151)$$

- a) Izraziti funkciju $\psi(x, 0)$ kao superpoziciju ravnih talasa.
- b) Koja je aproksimativna relacija između širine talasnog paketa u konfiguracionom (x) prostoru i njegove širine u k prostoru? c) Koristeći disperzionu relaciju za de Broglieve talase, odrediti funkciju $\psi(x, t)$ za bilo koje t .
- d) Diskutovati funkciju $|\psi(x, t)|^2$.
- e) Kako moramo odabrati konstantu A u skladu sa statističkom interpretacijom, da bi $\psi(x, t)$ opisivalo kretanje čestice?

Rješenje:

- a) Izražen kao superpozicija ravnih talasa, Gaussov talasni paket je oblika:

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \alpha(k) \exp(ikx) dk. \quad (1.152)$$

Koefficijenti $\alpha(k)$ predstavljaju parcijalne talase sa talasnim brojem k u Gaussovom talasnom paketu. Formiranjem Fourierovog transformata talasne funkcije možemo dobiti $\alpha(k)$:

$$\begin{aligned} \alpha(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) \exp(-ikx) dx \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0x - ikx\right) dx. \end{aligned} \quad (1.153)$$

Znajući da je

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi^2) d\xi = \sqrt{\pi}, \quad (1.154)$$

integral (1.153) se rješava svođenjem na potpuni kvadrat:

$$\alpha(k) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\left[\frac{x}{\sqrt{2a}} + \frac{ia(k - k_0)}{\sqrt{2}}\right]^2\right\} \exp\left[-\frac{a^2(k - k_0)^2}{2}\right] dx. \quad (1.155)$$

Uvođenjem smjene

$$\xi = \frac{x}{\sqrt{2a}} + \frac{ia(k - k_0)}{\sqrt{2}}, \quad d\xi = \frac{dx}{\sqrt{2a}}, \quad (1.156)$$

te korištenjem relacije (1.154) dobijamo:

$$\begin{aligned}\alpha(k) &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi^2) \sqrt{2a} \exp[-a^2(k-k_0)^2/2] d\xi \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{2a} \exp[-a^2(k-k_0)^2/2] \sqrt{\pi} \\ &= Aa \exp[-a^2(k-k_0)^2/2].\end{aligned}\quad (1.157)$$

b) Iz relacije (1.151) se vidi da je širina Gaussove funkcije približno $\Delta x \approx a$. Analogno, širina funkcije raspodjele ravnih talasa u (1.157) je data Gaussovom funkcijom $\exp[-a^2(k-k_0)^2/2]$, tako da je $\Delta k \approx 1/a$, čime se potvrđuje relacija neodređenosti $\Delta x \Delta k \sim 1$.

c) Opšti oblik talasne funkcije je:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \alpha(k) \exp[i(kx - \omega t)] dk. \quad (1.158)$$

Disperziona relacija za de Broglieve talase glasi:

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (1.159)$$

Uvrštavanjem $\alpha(k)$ iz (1.157) i (1.159) u (1.158) dobijamo:

$$\psi(x, t) = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{a^2(k-k_0)^2}{2} + ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t\right] dk. \quad (1.160)$$

Integral (1.160) se, analogno kao i integral (1.155), rješava svođenjem na potpuni kvadrat, pri čemu je u ovom slučaju:

$$\xi = \sqrt{\frac{ma^2 + i\hbar t}{2m}}k - \frac{a^2k_0 + ix}{\sqrt{2a^2 + 2\frac{i\hbar t}{m}}}, \quad d\xi = \sqrt{\frac{ma^2 + i\hbar t}{2m}}dk. \quad (1.161)$$

Tako se za vremenski-zavisnu talasnu funkciju dobija:

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{1 + i\hbar t/(ma^2)}} \exp\left\{-\frac{x^2 - 2ia^2k_0x + i(a^2\hbar k_0^2/m)t}{2a^2[1 + i\hbar t/(ma^2)]}\right\}. \quad (1.162)$$

d) Za $|\psi(x, t)|^2$ iz (1.162) dobijamo:

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{|A|^2}{\sqrt{1 + \hbar^2 t^2/(ma^2)^2}} \exp\left\{-\frac{(x - \hbar k_0 t/m)^2}{a^2[1 + \hbar^2 t^2/(ma^2)^2]}\right\}. \quad (1.163)$$

Gaussova funkcija ima maksimum na mjestu $x_{\text{ext}} = \hbar k_0 t / m$, odakle zaključujemo da se maksimum kreće grupnom brzinom $v = \hbar k_0 / m$. Međutim, talasni paket se širi: u trenutku $t = 0$ širina $|\psi|^2$ je samo a , dok je u nekom kasnijem trenutku t njegova širina $a' = a\sqrt{1 + \hbar^2 t^2 / (ma^2)^2}$.

e) Nezavisno od vremena, uslov normiranja za česticu glasi:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = |A|^2 a \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi^2) d\xi = |A|^2 a \sqrt{\pi}. \quad (1.164)$$

Prema tome, za $|A|$ dobijamo:

$$|A| = (a\sqrt{\pi})^{-1/2}. \quad (1.165)$$

Kako ovaj uslov vrijedi samo za apsolutnu vrijednost A , faza talasa je neodređena.

Zadatak 1.3.4. Za $1s$ i $2s$ elektrone, nenormirane talasne funkcije atoma vodonika su (sa a je označen Bohrov radijus):

$$\begin{aligned} \psi_{1s}(r, \theta, \varphi) &= \psi_{1s}(r) = \exp(-r/a), \\ \psi_{2s}(r, \theta, \varphi) &= \psi_{2s}(r) = \left(1 - \frac{r}{2a}\right) \exp(-r/(2a)). \end{aligned} \quad (1.166)$$

- (a) Dokazati ortogonalnost navedenih funkcija i naći konstantu normiranja.
- (b) Skicirati funkcije $|\psi_j(r)|^2$ i $4\pi r^2 |\psi_j(r)|^2$ za obadva slučaja $j = 1s, 2s$. Kakav je njihov fizikalni smisao?

Rješenje: (a) Uslov normiranja za funkcije $\tilde{\psi}_{1s}$ i $\tilde{\psi}_{2s}$, koje se od ψ_{1s} i ψ_{2s} razlikuju samo do na konstantan faktor, glasi:

$$\int |\tilde{\psi}_{1s}(\mathbf{r})|^2 dV = \int |\tilde{\psi}_{2s}(\mathbf{r})|^2 dV = 1. \quad (1.167)$$

Uslov ortogonalnosti funkcija ψ_{1s} i ψ_{2s} ima oblik:

$$\int \psi_{1s}^*(\mathbf{r}) \psi_{2s}(\mathbf{r}) dV = 0. \quad (1.168)$$

Da bismo odredili normirane talasne funkcije i provjerili njihovu ortogonalnost, koristit ćemo sferne koordinate i tablični integral:

$$\int_0^{\infty} x^{\nu-1} e^{-\mu x} dx = \frac{(\nu-1)!}{\mu^{\nu}} \quad (\nu \in \mathbb{N}_0). \quad (1.169)$$

Za integrale od funkcija $|\psi_{1s}|^2$ i $|\psi_{2s}|^2$ dobijamo:

$$\int |\psi_{1s}|^2 dV = 4\pi \int_0^{\infty} r^2 e^{-2r/a} dr = 4\pi \left(\frac{a}{2}\right)^3 2! = \pi a^3, \quad (1.170)$$

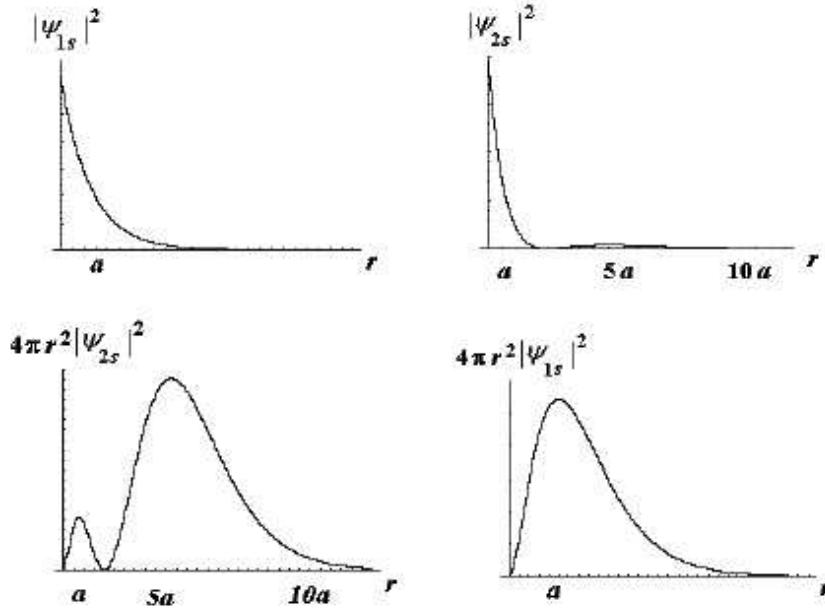
$$\begin{aligned}
 \int |\psi_{2s}|^2 dV &= 4\pi \int_0^\infty r^2 \left(1 - \frac{r}{2a}\right)^2 e^{-r/a} dr \\
 &= 4\pi \int_0^\infty \left(r^2 - \frac{r^3}{a} + \frac{r^4}{4a^2}\right) e^{-r/a} dr \\
 &= 4\pi \left(2!a^3 - \frac{1}{a}a^4 3! + \frac{1}{4a^2}a^5 4!\right) = 8\pi a^3. \quad (1.171)
 \end{aligned}$$

Dakle, normirane talasne funkcije su:

$$\tilde{\psi}_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \psi_{1s}, \quad \tilde{\psi}_{2s} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}} \psi_{2s}. \quad (1.172)$$

Provjerimo još njihovu ortogonalnost:

$$\begin{aligned}
 \int \psi_{1s}^* \psi_{2s} dV &= 4\pi \int_0^\infty r^2 \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-3r/2a} dr \\
 &= 4\pi \left[\left(\frac{2a}{3}\right)^3 2! - \frac{1}{2a} \left(\frac{2a}{3}\right)^4 3! \right] = 0. \quad (1.173)
 \end{aligned}$$



Slika 1.18: Gustoća vjerovatnoće (gornje slike) i gustoća vjerovatnoće u sfernoj ljusci (donje slike) za dvije talasne funkcije atoma vodonika.

(b) Vjerovatnoća nalaženja elektrona sa normiranom talasnom funkcijom ψ u elementu zapremine dV na mjestu određenim vektorom položaja

\mathbf{r} je $|\psi(\mathbf{r})|^2 dV$. Uslov normiranja $\int |\psi(\mathbf{r})|^2 dV = 1$ izražava činjenicu da je vjerovatnoća nalaženja elektrona u cijelom prostoru jednaka 1. Analogno, vjerovatnoća nalaženja elektrona u sfernoj ljusci radijusa r i debljine dr je:

$$\int_{\text{sfernoj ljusci}} |\psi|^2 dV = 4\pi r^2 |\psi(r)|^2 dr, \quad (1.174)$$

pod uslovom da je talasna funkcija nezavisna od uglova θ i φ (kao što je to kod nas slučaj). Za $1s$ i $2s$ elektrone, na priloženoj slici skicirane su funkcije $|\psi_j|^2$ i $4\pi r^2 |\psi_j|^2$ ($j = 1s, 2s$).

1.4 Dodaci

1.4.1 Zadaci sa pismenih ispita iz kvantne mehanike

Zadatak 1.1. Pokazati da su vlastite funkcije koje pripadaju dvjema različitim vlastitim vrijednostima hermitskog operatora međusobno ortogonalne.

Zadatak 1.2. Talasna funkcija $\psi(x, t)$ zadovoljava jednodimenzionalnu Schrödingerovu jednačinu za slobodnu česticu. Ako je talasni paket u trenutku $t = 0$ opisan funkcijom $\psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0x\right)$, odrediti $\psi(x, t)$, gustoću vjerovatnoće $\rho(x, t)$ i gustoću struje $j_x(x, t)$. [Uputa: Koristiti tablični integral: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = (\pi/a)^{1/2}$, $a > 0$.]

Zadatak 1.3. Za česticu opisanu talasnom funkcijom: $\psi(x) = (\pi/a)^{-1/4} \times \exp(-ax^2/2)$ izračunati $\Delta x = \sqrt{\bar{x}^2 - \bar{x}^2}$ i $\Delta p = \sqrt{\bar{p}^2 - \bar{p}^2}$ i potvrditi relaciju neodređenosti. [Uputa: Koristiti tablične integrale: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = (\pi/a)^{1/2}$, $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = -\frac{\partial}{\partial a} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2}(\pi/a^3)^{1/2}$, $a > 0$.]

Zadatak 1.4. Odrediti donju granicu mogućih vrijednosti energije jednodimenzionalnog linearнog harmonijskog oscilatora koristeći se relacijom neodređenosti $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$, $\Delta x = \sqrt{(x - \bar{x})^2}$, $\Delta p_x = \sqrt{(p_x - \bar{p}_x)^2}$. Odgovarajući hamiltonijan je $\hat{H} = \hat{p}_x^2/(2m) + m\omega^2 x^2/2$.

Zadatak 1.5. Izračunati očekivanu vrijednost operatora ukupne energije $\langle \hat{T} + \hat{V} \rangle$:

- (a) $2s$ -elektrona čija je talasna funkcija: $\psi_{200}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{\gamma^{3/2}}{\sqrt{\pi}} (1 - \gamma r) e^{-\gamma r}$,

(b) $2p$ -elektrona čija je talasna funkcija: $\psi_{21\pm 1}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{\gamma^{5/2}}{\sqrt{2\pi}} r e^{-\gamma r} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$. Tu je: $\gamma = 1/(2a_B)$, $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \frac{1}{r} = -\frac{2\hbar^2\gamma}{m} \frac{1}{r}$. Laplaceov operator u sfernim koordinatama je: $\Delta = \Delta_r + r^{-2}\Delta_{\vartheta,\varphi}$, $\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}$, $\Delta_{\vartheta,\varphi} = -\hbar^{-2} \hat{\mathbf{L}}^2 = \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \sin^{-2} \vartheta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$. (Uputa: Koristiti tablični integral: $\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = n!/a^{n+1}$, $a > 0$, $n > -1$.)

Zadatak 1.6. Neka su \hat{A} i \hat{B} hermitski operatori i $\hat{C} = -i [\hat{A}, \hat{B}] = -i (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$. $\hat{D} = \{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$. Provjerite slijedeću relaciju za očekivane vrijednosti: $\overline{\hat{A}^2} \overline{\hat{B}^2} \geq \frac{1}{4} (\overline{\hat{C}^2} + \overline{\hat{D}^2})$.

Zadatak 1.7.*⁶ Dvodimenzionalni talasni paket je opisan funkcijom: $\psi(x, y) = (\pi\sigma_{x0}^2)^{-1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_{x0}^2} + i\frac{p_0}{\hbar}x\right) (\pi\sigma_{y0}^2)^{-1/4} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_{y0}^2}\right)$.

(a) Koristeći dvodimenzionalnu Fourierovu transformaciju:

$$a(p_x, p_y) = (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, y) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y)\right] dx dy$$

odrediti vjerovatnoću da x komponenta impulsa bude u intervalu od p_x do $p_x + dp_x$ (pri tome je p_y proizvoljno). Kolika je vjerovatnoća da y komponenta impulsa bude u intervalu od p_y do $p_y + dp_y$?

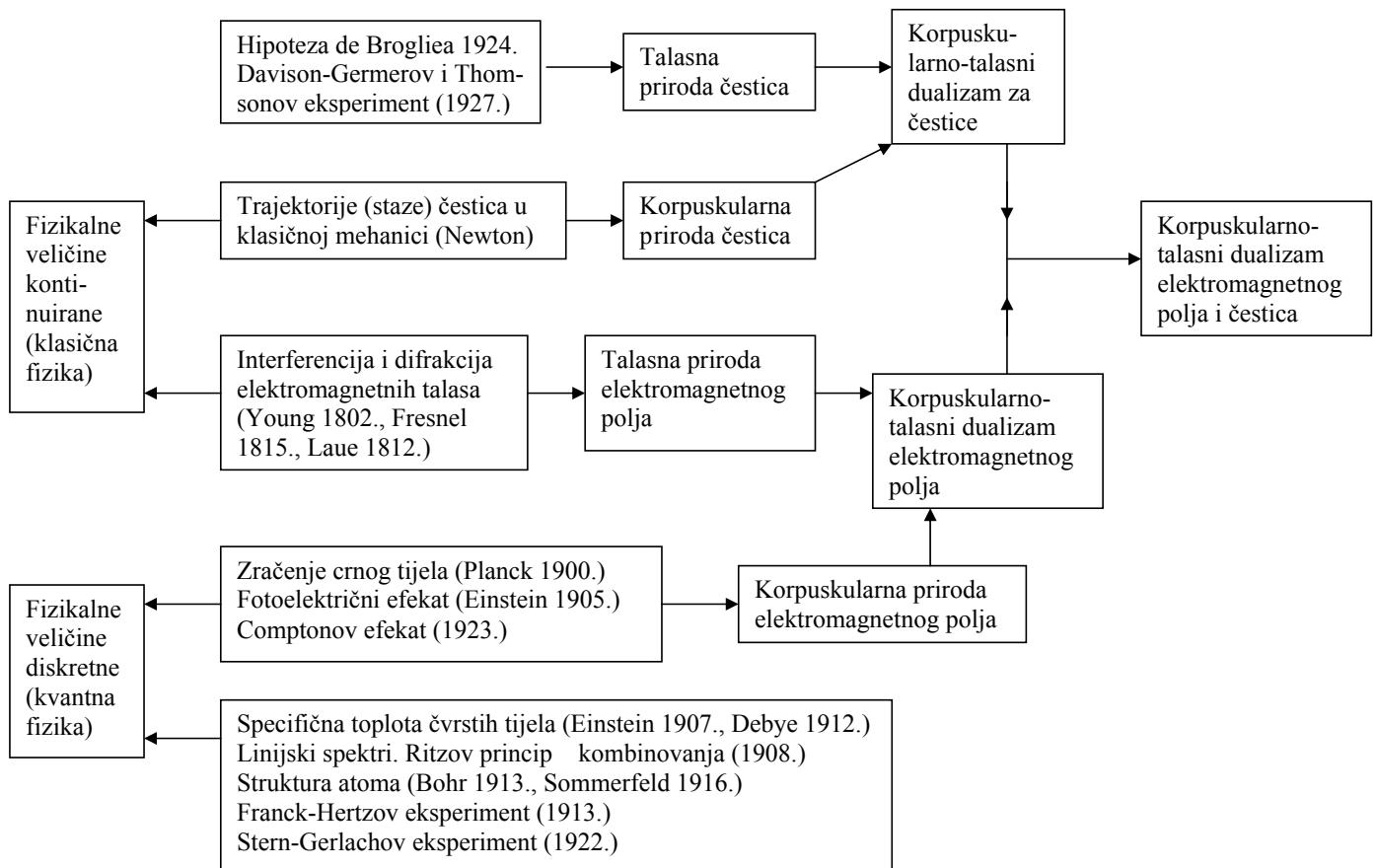
(b) Izračunati $\Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - \overline{x}^2}$ i $\Delta p_x = \sqrt{\overline{p_x^2} - \overline{p_x}^2}$ i potvrditi relaciju neodređenosti.

[Uputa: Koristiti tablične integrale: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx} dx = \sqrt{\pi/a} \exp(b^2/(4a))$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} (\pi/a^3)^{1/2}, \quad a > 0.]$$

⁶Zadaci označeni sa * su veće težine.

1.4.2 Razvoj korpuskularno-talasnog dualizma elektromagnetskog polja i čestica od klasične do kvantne fizike



Poglavlje 2

Matematičke osnove kvantne mehanike I

2.1 Osobine operatora

Već smo koristili srednje vrijednosti položaja i impulsa čestice i vidjeli da možemo dobiti srednju vrijednost observable F [predstavljene operatorom $\hat{F}(\hat{x}, \hat{p})$] u stanju ψ pomoću relacije

$$\langle \hat{F} \rangle \equiv \bar{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi dV, \quad (2.1)$$

gdje je \hat{F} operator koji je na neki način povezan sa F . Ovdje ćemo prvo reći nešto o operatorima uopšte, a zatim ćemo odrediti klasu operatora koja je bitna za kvantnu mehaniku.

Neka su U i W dva skupa funkcija. Definišimo kontinuirano preslikavanje $\hat{L}: U \rightarrow W$ gdje je $\hat{L}(u) = w$ ($u \in U; w \in W$), i nazovimo \hat{L} operatorom. Operator \hat{L} povezuje funkciju $u \in U$ sa novom funkcijom $w \in W$. Simbolično ovu relaciju pišemo kao proizvod operatora \hat{L} i funkcije u :

$$\hat{L}(u) = \hat{L}u = w.$$

Operator sa osobinom

$$\hat{L}(\alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2) = \alpha_1 \hat{L}u_1 + \alpha_2 \hat{L}u_2, \quad (2.2)$$

gdje su u_1 i u_2 proizvoljne funkcije, a α_1 i α_2 proizvoljne konstante, se naziva *linearni operator*.

Vidimo da su operator položaja $\hat{x} = x$ i operator impulsa $\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$ linearni operatori. Tipičan nelinearni operator je, na primjer, operator kvadratnog korijena, jer očito vrijedi $\sqrt{\alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2} \neq \alpha_1 \sqrt{u_1} + \alpha_2 \sqrt{u_2}$. Dalje,

linearni operator je *samo-adjungirani* ili *hermitski* ako je

$$\int \psi_1^* \hat{L} \psi_2 dV = \int (\hat{L} \psi_1)^* \psi_2 dV, \quad (2.3)$$

gdje su ψ_1 i ψ_2 proizvoljne kvadratično-integrabilne funkcije, čiji izvodi iščezavaju na granicama oblasti integriranja.

U kvantnoj mehanici zahtjevamo da svi operatori budu linearni i hermitski. Zahtjev da kvantno-mehanički operatori budu linearni je povezan sa zahtjevom da vrijedi princip superpozicije. Naravno, linearni operatori ne narušavaju princip superpozicije. Da bismo bili u stanju da opišemo mjerljive veličine sa našim operatorima moramo zahtjevati da njihove srednje vrijednosti budu realne. Taj zahtjev je zadovoljen upravo za hermitske operatore. Naime, za srednju vrijednost hermitskog operatora \hat{L} vrijedi

$$\bar{L} = \int \psi^* \hat{L} \psi dV = \int (\hat{L} \psi)^* \psi dV = \left[\int \psi^* (\hat{L} \psi) dV \right]^* = \bar{L}^*, \quad (2.4)$$

tako da je srednja vrijednost \bar{L} observable L realna.

2.2 Kombinovanje dva operatora

Sumu $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$ dva operatora \hat{A} i \hat{B} definišemo relacijom

$$\hat{C}\psi = (\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi, \quad (2.5)$$

koja vrijedi za proizvoljnu funkciju ψ . Ako su \hat{A} i \hat{B} hermitski tada je $\hat{A} + \hat{B}$ također hermitski operator. Proizvod $\hat{D} = \hat{A}\hat{B}$ operatora \hat{A} i \hat{B} definišemo pomoću

$$\hat{D}\psi = (\hat{A}\hat{B})\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi). \quad (2.6)$$

Ovdje operator \hat{B} djeluje prvo na ψ , a zatim operator \hat{A} djeluje na novu funkciju $(\hat{B}\psi)$.

Važno je uočiti da je bitan poredak operatora u proizvodu dva operatora: općenito vrijedi da je $\hat{A}(\hat{B}\psi) \neq \hat{B}(\hat{A}\psi)$, $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0$, tj. operatori \hat{A} i \hat{B} ne komutiraju. Na primjer $\hat{p}_x x\psi \neq x\hat{p}_x\psi$, jer je $(-\imath\hbar\partial/\partial x)(x\psi) \neq x(-\imath\hbar\partial\psi/\partial x)$.

Dva operatora komutiraju ako i samo ako je

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0. \quad (2.7)$$

Ovaj izraz nazivamo *komutator* i pišemo ga kao

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}]_{-}. \quad (2.8)$$

Analogno definišemo *antikomutator* kao¹

$$\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}]_+. \quad (2.9)$$

Sada ćemo naći odgovor na pitanje pod kojim uslovima je proizvod $\hat{A}\hat{B}$ dva hermitska operatora također hermitski operator. Napišimo proizvod $\hat{A}\hat{B}$ kao

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]_+ + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]_-. \quad (2.10)$$

Pokazat ćemo da je član $\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]_+$ uvijek hermitski, dok operator $\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]_-$ nikada nije hermitski. Vrijedi:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int \psi_1^* [\hat{A}, \hat{B}]_\pm \psi_2 dV &= \frac{1}{2} \int \psi_1^* (\hat{A}\hat{B} \pm \hat{B}\hat{A}) \psi_2 dV \\ &= \frac{1}{2} \int (\hat{A}\psi_1)^* \hat{B}\psi_2 dV \pm \frac{1}{2} \int (\hat{B}\psi_1)^* \hat{A}\psi_2 dV \\ &= \frac{1}{2} \int (\hat{B}\hat{A}\psi_1)^* \psi_2 dV \pm \frac{1}{2} \int (\hat{A}\hat{B}\psi_1)^* \psi_2 dV \\ &= \frac{1}{2} \int (\hat{B}\hat{A} \pm \hat{A}\hat{B})^* \psi_1^* \psi_2 dV \\ &= \frac{1}{2} \int [\hat{B}, \hat{A}]_\pm^* \psi_1^* \psi_2 dV. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Kako je $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}$, operator $\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]_+$ je uvijek hermitski, a kako je $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = -(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})$, operator $\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]_-$ je hermitski samo ako je jednak nuli. Dakle, proizvod $\hat{A}\hat{B}$ komutirajućih hermitskih operatora je također hermitski operator. Kako svaki operator komutira sam sa sobom, \hat{A}^n je hermitski ako je \hat{A} hermitski. Operator $\hat{A}^n\hat{B}^m$ je hermitski, ako su \hat{A} i \hat{B} hermitski i komutiraju.

2.3 Diracova bra i ket notacija

Integral $\int \psi_1^* \psi_2 dV$ se može posmatrati kao skalarni proizvod kvadratično-integrabilnih funkcija ψ_1 i ψ_2 . Obično se koristi slijedeća skraćena notacija:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int \psi_1^* \psi_2 dV. \quad (2.12)$$

Ovo se interpretira kao proizvod dva elementa $\langle \psi_1 |$ i $|\psi_2 \rangle$. Element $\langle \psi_1 |$ se naziva "bra", a $|\psi_2 \rangle$ "ket".² Oni zajedno formiraju "bra-ket" (engl. bracket

¹Često se koriste i slijedeće oznake: $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv [\hat{A}, \hat{B}]_-$ i $\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv [\hat{A}, \hat{B}]_+$.

²Ova definicija je potekla od čuvenog fizičara P. A. M. Diraca (Dirak), o čijem ćemo doprinosu teorijskoj fizici će biti više riječi u okviru relativističke kvantne mehanike.

- zagrada). I $\langle \psi_1 |$ i $|\psi_2 \rangle$ su vektori (vektori stanja) u linearном vektorskom prostoru. Mnoge relacije u kvantnoj mehanici se mogu napisati na kraći način korištenjem ove notacije (umjesto predstavljanja pomoću integrala).

Vektori stanja su vektori u kompleksnom linearom vektorskom prostoru sa ortonormiranim bazom. Svaki izraz u integralnoj reprezentaciji je povezan sa izrazom u Diracovoј notaciji. Na primjer, relacija ortonormiranosti ima oblik

$$\int \psi_m^* \psi_n dV = \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}. \quad (2.13)$$

Očito je da vrijedi $|\psi\rangle^* = \langle\psi|$. Izraz za očekivanu vrijednost operatora \hat{L} se može napisati kao

$$\langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle = \int \psi^* \hat{L} \psi dV, \quad (2.14)$$

a hermitičnost operatora \hat{L} se izražava relacijom

$$\langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle = \langle \hat{L} \psi | \psi \rangle. \quad (2.15)$$

2.4 Svojstvene vrijednosti i svojstvene funkcije

Da bismo dobili više informacija o hermitskom operatoru \hat{L} i o fizikalnim veličinama koje su povezane sa njim, pored poznavanja srednje vrijednosti \bar{L} , potrebno je razmotriti srednju kvadratnu devijaciju (odstupanje) $\overline{(\Delta L)^2}$. Nađimo prvo kvantno-mehanički operator koji opisuje tu veličinu. Devijacija od srednje vrijednosti je određena operatorom

$$\Delta \hat{L} = \hat{L} - \bar{L}, \quad (2.16)$$

a kvadrat devijacije je

$$(\Delta \hat{L})^2 = (\hat{L} - \bar{L})^2. \quad (2.17)$$

Srednja kvadratna devijacija se može izraziti kao

$$\overline{(\Delta L)^2} = \int \psi^* (\Delta \hat{L})^2 \psi dV, \quad (2.18)$$

i mora biti veća ili jednaka nuli (nenegativna). Zaista, iz

$$\overline{(\Delta L)^2} = \int \psi^* (\Delta \hat{L})^2 \psi dV \quad (2.19)$$

i hermitičnosti operatora $\Delta \hat{L}$ slijedi da je

$$\overline{(\Delta L)^2} = \int (\Delta \hat{L} \psi)^* (\Delta \hat{L} \psi) dV = \int |\Delta \hat{L} \psi|^2 dV \geq 0. \quad (2.20)$$

Pošto je podintegralna funkcija nenegativna, integral je pozitivno definitan, pa je $\overline{(\Delta L)^2}$ također pozitivno definitno.

Potražimo sada ona stanja ψ_L za koje veličina L ima konstantnu vrijednost, tj. za koja je devijacija ΔL od L jednaka nuli. Za takva stanja vrijedi $\overline{(\Delta L)^2} = 0$, tj.

$$\int |\Delta \hat{L}\psi_L|^2 dV = 0. \quad (2.21)$$

Podintegralna funkcija je realna i veća ili jednaka nuli (kao apsolutna vrijednost kompleksne funkcije). Dakle, vrijedi

$$\Delta \hat{L}\psi_L = 0. \quad (2.22)$$

Koristeći se definicijom operatora $\Delta \hat{L}$ ovu relaciju možemo prepisati kao

$$(\hat{L} - \bar{L})\psi_L = 0, \quad (2.23)$$

tako da, pošto možemo pisati da je $\bar{L} = L$ u stanju ψ_L , vrijedi relacija

$$\hat{L}\psi_L = L\psi_L. \quad (2.24)$$

Jednačina ove vrste se naziva jednačina za vlastite (svojstvene) vrijednosti. ψ_L zovemo *vlastitom funkcijom*, a L *vlastitom vrijednošću* operatora \hat{L} . Općenito, operator \hat{L} ima nekoliko vlastitih funkcija ψ_L sa njima pridruženim vlastitim vrijednostima L_ν . Vlastite vrijednosti L_ν mogu formirati *diskretan spektar* L_1, L_2, L_3, \dots ili *kontinuiran spektar*. U drugom slučaju, vlastite vrijednosti L uzimaju (poprimaju) bilo koje vrijednosti u intervalu $L_n \leq L \leq L_{n+1}$. Uskoro ćemo se susresti sa operatorima sa diskretnim, kontinuiranim i miješanim spektrom (vidjeti sliku 2.1).

Sada ćemo ispitati neke opšte osobine vlastitih funkcija. Ograničit ćemo se na vlastite funkcije hermitskih operatora i na slučaj diskretnog spektra. Može se pokazati da su vlastite funkcije koje pripadaju dvjema različitim vlastitim vrijednostima međusobno ortogonalne. Neka su ψ_n i ψ_m vlastite funkcije koje odgovaraju vlastitim vrijednostima L_n i L_m , tj.

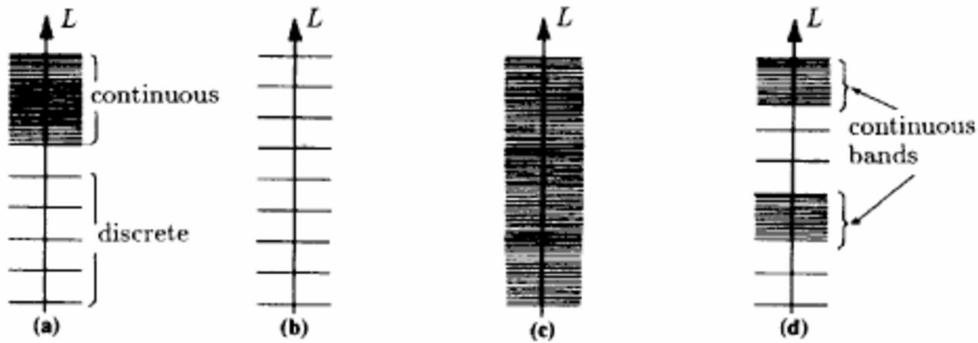
$$\hat{L}\psi_m = L_m\psi_m, \quad \hat{L}\psi_n = L_n\psi_n. \quad (2.25)$$

Uzimajući u obzir da su vlastite vrijednosti realne, kompleksnim konjugovanjem prve jednačine nalazimo da je

$$\hat{L}^*\psi_m^* = L_m^*\psi_m^* = L_m\psi_m^*. \quad (2.26)$$

Množeći slijeva drugu jednačinu iz (2.25) sa ψ_m^* , a jednačinu (2.26) sa ψ_n , dobijamo

$$\psi_m^* \hat{L}\psi_n = \psi_m^* L_n \psi_n, \quad \psi_n \hat{L}^*\psi_m^* = \psi_n L_m \psi_m^*. \quad (2.27)$$



Slika 2.1: Primjeri spektara: (a) opšti spektar, (b) potpuno diskretni spektar (engl. discrete), (c) potpuno kontinuirani spektar (engl. continuous), (d) spektar sa kontinuiranim zonama (trakama; engl. bands), npr. kao u energetskom spektru kristalne rešetke.

Oduzimanjem druge jednačine od prve nalazimo da je

$$\psi_m^* \hat{L} \psi_n - \psi_n \hat{L}^* \psi_m^* = \psi_n \psi_m^* (L_n - L_m). \quad (2.28)$$

Ako integriramo po cijeloj zapremini V , dobijamo

$$\int \psi_m^* \hat{L} \psi_n dV - \int \psi_n \hat{L}^* \psi_m^* dV = (L_n - L_m) \int \psi_n \psi_m^* dV. \quad (2.29)$$

Pošto je \hat{L} hermitski operator integrali na lijevoj strani gornje jednačine su međusobno jednakim, tako da je

$$0 = (L_n - L_m) \int \psi_n \psi_m^* dV. \quad (2.30)$$

Zahtjevali smo da je $L_n \neq L_m$, tako da je

$$0 = \int \psi_n \psi_m^* dV, \quad (2.31)$$

što je traženi rezultat, tj. dokazali smo da su vlastite funkcije ψ_n i ψ_m koje odgovaraju različitim vlastitim vrijednostima međusobno ortogonalne.

Kako su vlastite funkcije diskretnog spektra kvadratično-integrabilne, to se one mogu normirati na jedinicu:

$$\int \psi_n \psi_n^* dV = 1. \quad (2.32)$$

Kombinovanjem relacija (2.31) i (2.32) dobijamo

$$\int \psi_n \psi_m^* dV = \delta_{nm}. \quad (2.33)$$

Dakle, vlastite funkcije ψ čine ortonormirani sistem (skup) funkcija.

Općenito, ako postoji nekoliko vlastitih funkcija za svaku vlastitu vrijednost L_n takva stanja nazivamo *degenerisanim stanjima*. Preciznije, ako različite vlastite funkcije $\psi_{n1}, \dots, \psi_{na}$ pripadaju vlastitoj vrijednosti L_n , govorimo o a -strukoj degeneraciji. Fizikalno, ova degeneracija je povezana sa mogućnošću da se određena vrijednost observable L realizira u različitim stanjima.

Dokazali smo da su vlastite funkcije diskretnog spektra sa različitim vlastitim vrijednostima međusobno ortogonalne. Ako imamo degeneraciju, funkcije ψ_{nk} su povezane sa istom vlastitom vrijednošću L_n : $\hat{L}\psi_{nk} = L_n\psi_{nk}$ gdje je $k = 1, \dots, a$. U opštem slučaju te funkcije nisu ortogonalne. Međutim, i u tom slučaju se uvijek mogu naći ortogonalne funkcije, kao što ćemo sada pokazati.

Prepostavimo da su vlastite funkcije ψ_{nk} ($k = 1, \dots, a$), povezane sa vlastitim vrijednostima L_n , linearne nezavisne, tj. da ako je $\sum_{k=1}^a a_k \psi_{nk} = 0$, tada vrijedi da je $a_k = 0$ za svaki k . Kada ne bismo mogli zaključiti da je $a_k = 0$ za svaki k , mogli bismo izraziti barem jednu funkciju kao linearu kombinaciju ostalih, tako da bi broj vlastitih funkcija bio manji od a . Ako je skup funkcija ψ_{nk} ortogonalan, možemo ga iskoristiti kako bismo opisali određeno stanje. Ako nije ortogonalan, tada ovaj skup transformišemo u novi skup, tj.

$$\varphi_{n\alpha} = \sum_{k=1}^a a_{\alpha k} \psi_{nk}, \quad \alpha = 1, \dots, a. \quad (2.34)$$

Ova transformacija je linearna, tako da su funkcije $\varphi_{n\alpha}$ također vlastite funkcije operatora \hat{L} sa vlastitim vrijednostima L_n . Sada zahtjevamo da nove funkcije $\varphi_{n\alpha}$ budu ortonormirane:

$$\int \varphi_{n\alpha}^* \varphi_{n\beta} dV = \delta_{\alpha\beta}.$$

Uslovi koje koeficijenti $a_{\alpha k}$ moraju ispunjavati da bi opisali transformaciju na ortonormirani sistem funkcija su

$$\sum_{k=1}^a \sum_{k'=1}^a a_{\alpha k}^* a_{\beta k'} s_{kk'} = \delta_{\alpha\beta}, \quad \text{gdje je } s_{kk'} = \int \psi_{nk}^* \psi_{nk'} dV. \quad (2.35)$$

Funkcije ψ_{nk} posmatramo kao vektore u a -dimenzionalnom prostoru funkcija, a $s_{kk'}$ kao skalarne proizvode ovih vektora. Tada, po analogiji sa geometrijom,

transformaciju (2.34) možemo posmatrati kao transformaciju sa kosouglog (neortogonalnog) na pravougli (ortogonalni) koordinatni sistem.

Za nalaženje ortonormiranog skupa vlastitih funkcija u slučaju degenerisanog spektra primjenjuje se praktični metod koji je u geometriji (linearnoj algebri i vektorskoj analizi) poznat kao *Schmidtov metod ortogonalizacije*. U prvom koraku se uzme jedan vektor (stanje), na primjer ψ_{n1} , i definiše normirana talasna funkcija $\varphi_{n1} = \psi_{n1}/\sqrt{\langle\psi_{n1}|\psi_{n1}\rangle}$. U slijedećem koraku se konstruiše vektor $\varphi_{n2} = \alpha\varphi_{n1} + \beta\psi_{n2}$ i zahtjeva da je $\langle\varphi_{n1}|\varphi_{n2}\rangle = \alpha\langle\varphi_{n1}|\varphi_{n1}\rangle + \beta\langle\varphi_{n1}|\psi_{n2}\rangle = 0$. Slijedi da je $\alpha/\beta = -\langle\varphi_{n1}|\psi_{n2}\rangle$. Pored ovog uslova, potrebno je vektor i normirati, tj. nametnuti uslov $\langle\varphi_{n2}|\varphi_{n2}\rangle = 1$. Primjenom ova dva uslova se mogu odrediti koeficijenti α i β . Treći korak je konstruisanje vektora stanja $\varphi_{n3} = \alpha'\varphi_{n1} + \beta'\varphi_{n2} + \gamma\psi_{n3}$. Kao i ranije, zahtjevamo ortogonalnost ovog vektora (stanja) na vektore φ_{n1} i φ_{n2} , kao i to da je φ_{n3} normiran na jedinicu. Dakle, imamo tri uslova za određivanje α' , β' i γ . Dalji postupak je analogan prethodnom.

Zapazimo da je ova transformacija definisana samo do na ortogonalnu transformaciju. Ako su funkcije ψ_{nk} već ortogonalne, tada je $s_{kk'} = \delta_{kk'}$ i vrijedi

$$\sum_{k=1}^a a_{\alpha k}^* a_{\beta k} = \delta_{\alpha\beta}. \quad (2.36)$$

Ovo je uslov da transformacija bude ortogonalna.

U slučaju *kontinuiranog spektra* ne možemo numerisati vlastite vrijednosti i vlastite funkcije. Umjesto toga, parametriziramo vlastite funkcije, uzimajući vlastite vrijednosti za parametre. Tada jednačina

$$\hat{L}\psi_n(\mathbf{r}) = L_n\psi_n(\mathbf{r}) \quad (2.37)$$

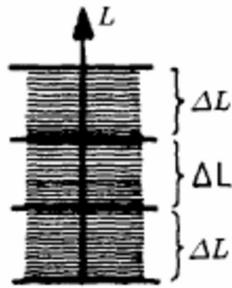
postaje

$$\hat{L}\psi(\mathbf{r}, L) = L\psi(\mathbf{r}, L), \quad (2.38)$$

gdje je $\mathbf{r} \equiv (x, y, z)$. Pomoću talasnih funkcija koje nisu ortogonalne možemo definisati *Weylove vlastite diferencijale*:

$$\Delta\psi(\mathbf{r}, L) = \int_L^{L+\Delta L} \psi(\mathbf{r}, L') dL'. \quad (2.39)$$

Oni dijele kontinuirani spektar vlastitih vrijednosti L na diskretne regije veličine ΔL (vidjeti sliku 2.2). Vlastiti diferencijali su ortogonalni i mogu biti normirani (vidjeti odjeljak 2.11).



Slika 2.2: Sjeckanje kontinuiranog spektra integriranjem funkcije $\psi(\mathbf{r}, L)$ po intervalima ΔL vodi do Weylovih vlastitih diferencijala.

2.5 Mjerljivost različitih opservabli u istim trenucima

Iz Heisenbergovog principa neodređenosti znamo da je nemoguće istovremeno i tačno mjeriti koordinatu i impuls čestice. Vrijednost opservable je jednoznačno (nedvojbeno) definisana ako je talasna funkcija vlastita funkcija operatora povezanog sa tom opservablom, tj.

$$\hat{L}\psi_n = L_n\psi_n. \quad (2.40)$$

Tada je opservabla L u stanju ψ_n dobro definisana, tj. ima tačnu (precizno određenu) vrijednost L_n i njena srednja kvadratna devijacija (ΔL)² je jednak nuli. Općenito, ψ_n nije vlastita funkcija nekog drugog operatora \hat{M} . Dakle, ne možemo dobiti informaciju (izvesti zaključke) o opservabli M na osnovu poznavanja talasne funkcije ψ_n . Jedino ako je ψ_n također vlastita funkcija operatora \hat{M} , možemo precizno mjeriti i M i L , tj.

$$\hat{L}\psi_n = L_n\psi_n \quad \text{i} \quad \hat{M}\psi_n = M_n\psi_n \quad (2.41)$$

za svaku funkciju ψ_n . Pošto su obje gornje jednačine ispunjene, dobijamo da je $[\hat{L}, \hat{M}]_-\psi_n = 0$. Naime, vrijedi $\hat{M}\hat{L}\psi_n = L_n\hat{M}\psi_n = L_nM_n\psi_n$ i $\hat{L}\hat{M}\psi_n = M_n\hat{L}\psi_n = M_nL_n\psi_n$, pa oduzimanjem dobijamo da je $(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M})\psi_n = 0$. Skup vlastitih funkcija ψ_n hermitskog operatora \hat{L} je kompletan. Prema tome, proizvoljna funkcija ψ se može razviti po ψ_n , tj. $\psi = \sum_n c_n\psi_n$. Očito je tada $(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M})\psi = 0$. Pošto je ψ proizvoljna funkcija, vrijedi operatorska jednačina $\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M} = 0$.

Dakle, ako se dvije opservable mogu istovremeno mjeriti tada je njihov komutator jednak nuli. Pokažimo sada da vrijedi i obrnuto, tj. da ako je $[\hat{L}, \hat{M}]_- = 0$, tada se opservable L i M mogu istovremeno mjeriti. Kao

prvo, iz $\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = 0$ slijedi da je $\hat{L}\hat{M}\psi = \hat{M}\hat{L}\psi$ za svako ψ . Ako je ψ vlastita funkcija operatora \hat{L} , dobijamo da je $\hat{L}(\hat{M}\psi) = L(\hat{M}\psi)$, pa je i $\psi' = \hat{M}\psi$ također vlastita funkcija operatora \hat{L} . Ako vlastita vrijednost L nije degenerisana, možemo zaključiti da je $\hat{M}\psi = M\psi$; tj. $\psi' = M\psi$ (ψ' je umnožak ψ).

U slučaju degeneracije, $\psi' = \hat{M}\psi$ može biti linearna kombinacija f degenerisanih vlastitih funkcija ψ_k ($k = 1, 2, \dots, f$) koje odgovaraju vlastitoj vrijednosti L . Tada imamo

$$\psi'_k = \sum_{k'=1}^f M_{kk'}\psi_{k'}, \quad k = 1, 2, \dots, f, \quad (2.42)$$

tj. ne možemo zaključiti da je ψ' jednostavan umnožak ψ . Međutim, pošto je izbor polaznih talasnih funkcija proizvoljan (sjetimo se da za svaki ψ mora vrijediti $\hat{L}\hat{M}\psi = \hat{M}\hat{L}\psi$), to umjesto ψ_k možemo koristiti linearnu kombinaciju

$$\varphi = \sum_{k'=1}^f a_{k'}\psi_{k'} \quad (2.43)$$

kao početnu talasnu funkciju. Naravno, također vrijedi

$$\hat{L}\varphi = L\varphi. \quad (2.44)$$

Sada ćemo izabrati koeficijente a_k na takav način da vrijedi

$$\hat{M}\varphi = M\varphi. \quad (2.45)$$

Ovo možemo uraditi zato što uvrštavanjem φ u jednačinu (2.45) dobijamo

$$\sum_{k'=1}^f a_{k'} \hat{M}\psi_{k'} = M \sum_{k'=1}^f a_{k'} \psi_{k'}. \quad (2.46)$$

Nakon množenja sa bra vektorom $\langle k|$ (što odgovara operaciji $\int \psi_k^* \dots dV$) i korištenja uslova ortogonalnosti $\langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = \delta_{kk'}$ dobijamo

$$\sum_{k'=1}^f \langle k | \hat{M} | k' \rangle a_{k'} = Ma_k. \quad (2.47)$$

Uvedimo skraćenu oznaku za matrični element: $M_{kk'} \equiv \langle k | \hat{M} | k' \rangle$. Pošto smo dobili linearni homogeni sistem jednačina za $a_{k'}$, njegova determinanta mora

biti jednaka nuli, tj.

$$\begin{vmatrix} M_{11} - M & M_{12} & \dots & M_{1f} \\ M_{21} & M_{22} - M & \dots & M_{2f} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ M_{f1} & M_{f2} & \dots & M_{ff} - M \end{vmatrix} = 0. \quad (2.48)$$

Rješenje ove jednačine daje vlastite vrijednosti M . Vidimo da u slučaju degeneracije vlastitih funkcija ψ_k operatora \hat{L} možemo konstruisati talasne funkcije $\varphi = \sum_k a_k \psi_k$, koje su istovremeno vlastite funkcije i \hat{L} i \hat{M} . Dakle, i u tom slučaju se opservable L i M mogu istovremeno mjeriti, što smo i željeli dokazati. Matematičkim jezikom rečeno, u ovom odjeljku smo pokazali da je relacija (2.41) ekvivalentna uslovu $[\hat{L}, \hat{M}]_- = 0$.

2.6 Operatori položaja i impulsa

Za talasnu funkciju $\psi = \psi(\mathbf{r})$, operator položaja je sam (prostorni) vektor položaja:

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}. \quad (2.49)$$

Njegove komponente su

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z. \quad (2.49a)$$

Operator impulsa se izražava kao

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla, \quad (2.50)$$

i njegove komponente su

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (2.50a)$$

Komutatori su

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_x]_- &= [\hat{y}, \hat{p}_y]_- = [\hat{z}, \hat{p}_z]_- = i\hbar, \\ [\hat{x}, \hat{p}_y]_- &= [\hat{x}, \hat{p}_z]_- = [\hat{y}, \hat{p}_x]_- = [\hat{y}, \hat{p}_z]_- = [\hat{z}, \hat{p}_x]_- = [\hat{z}, \hat{p}_y]_- = 0. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Dakle, vrijede relacije neodređenosti između koordinata i njima pridruženih kanonsko-konjugovanih impulsa (x i p_x , y i p_y , z i p_z). One se ne mogu istovremeno tačno mjeriti (vidjeti naredni odjeljak, gdje će ovo biti prodiskutovano u detalje). S druge strane, npr. operatori \hat{x} i \hat{p}_y komutiraju. Dakle, ove dvije

opservable se mogu istovremeno mjeriti sa proizvoljnom tačnošću. Njihova zajednička svojstvena stanja su

$$\sqrt{\delta(x - x_0)} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_y y\right), \quad \text{itd.} \quad (2.52)$$

Definicija δ funkcije će biti data kasnije.

2.7 Heisenbergove relacije neodređenosti za proizvoljne opservable

Sada smo u poziciji da razmotrimo relacije neodređenosti na opštiji način. Neka su dvije fizikalne veličine opisane hermitskim operatorima \hat{A} i \hat{B} [npr. $\hat{A} = \hat{x}$ je operator položaja i $\hat{B} = \hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$ je operator impulsa]. Komutator ova dva operatora se piše kao

$$[\hat{A}, \hat{B}]_- = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hat{C}, \quad (2.53)$$

gdje se \hat{C} naziva *ostatak komutiranja*. \hat{C} može biti nula; tada \hat{A} i \hat{B} komutiraju. Pokažimo da je \hat{C} hermitski operator. Vrijedi:

$$\begin{aligned} \int \psi_1^* [\hat{A}, \hat{B}]_- \psi_2 dx &= \int \psi_1^* (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \psi_2 dx \\ &= \int [(\hat{A}\psi_1)^* \hat{B}\psi_2 - (\hat{B}\psi_1)^* \hat{A}\psi_2] dx \\ &= \int [(\hat{B}\hat{A}\psi_1)^* \psi_2 - (\hat{A}\hat{B}\psi_1)^* \psi_2] dx \\ &= \int [(\hat{B}^* \hat{A}^* - \hat{A}^* \hat{B}^*) \psi_1^*] \psi_2 dx \\ &= - \int [(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \psi_1]^* \psi_2 dx, \end{aligned} \quad (2.54)$$

tako da je, na osnovu (2.53),

$$\begin{aligned} \int \psi_1^* i\hat{C} \psi_2 dx &= - \int (i\hat{C}\psi_1)^* \psi_2 dx \quad \text{ili} \\ \int \psi_1^* \hat{C} \psi_2 dx &= \int (\hat{C}\psi_1)^* \psi_2 dx, \end{aligned} \quad (2.55)$$

čime je dokazano da je \hat{C} hermitski operator. Ovo se može dokazati i na kraći način (\dagger značava hermitsko adjungiranje):

$$\begin{aligned} -i\hat{C}^\dagger &= (i\hat{C})^\dagger = [\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = (\hat{A}\hat{B})^\dagger - (\hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger \hat{B}^\dagger \\ &= \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{A}, \hat{B}]_- = -i\hat{C} \Rightarrow \hat{C} = \hat{C}^\dagger. \end{aligned}$$

2.7 Heisenbergove relacije neodređenosti za proizv. opservable 73

Fizikalne veličine koje odgovaraju operatorima \hat{A} i \hat{B} u nekom proizvoljnom stanju ψ imaju srednje vrijednosti

$$\bar{A} = \int \psi^* \hat{A} \psi dx \quad \text{i} \quad \bar{B} = \int \psi^* \hat{B} \psi dx. \quad (2.56)$$

Kao i ranije, uvodimo operatore za devijaciju od srednje vrijednosti

$$\Delta \hat{A} = \hat{A} - \bar{A} \quad \text{i} \quad \Delta \hat{B} = \hat{B} - \bar{B}. \quad (2.57)$$

Operatori $\Delta \hat{A}$ i $\Delta \hat{B}$ zadovoljavaju iste komutacione relacije kao i operatori \hat{A} i \hat{B} , tj.

$$[\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}]_- = i \hat{C}.$$

Analogno našem razmatranju u slučaju relacija neodređenosti za operatore \hat{p}_x i \hat{x} , ispitujemo integral

$$I(\alpha) = \int |(\alpha \Delta \hat{A} - i \Delta \hat{B}) \psi|^2 dx \geq 0, \quad (2.58)$$

koji zavisi od nekog realnog parametra α . Kako su $\Delta \hat{A}$ i $\Delta \hat{B}$ hermitski, možemo pisati

$$\begin{aligned} I(\alpha) &= \int (\alpha \Delta \hat{A} - i \Delta \hat{B})^* \psi^* (\alpha \Delta \hat{A} - i \Delta \hat{B}) \psi dx \\ &= \int \psi^* (\alpha \Delta \hat{A} + i \Delta \hat{B}) (\alpha \Delta \hat{A} - i \Delta \hat{B}) \psi dx \\ &= \int \psi^* [\alpha^2 (\Delta \hat{A})^2 + i\alpha (\Delta \hat{B} \Delta \hat{A} - \Delta \hat{A} \Delta \hat{B}) + (\Delta \hat{B})^2] \psi dx \\ &= \int \psi^* [\alpha^2 (\Delta \hat{A})^2 + \alpha \hat{C} + (\Delta \hat{B})^2] \psi dx \geq 0. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Uvodeći označke $\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \equiv \overline{(\Delta A)^2}$, $\langle \hat{C} \rangle \equiv \bar{C}$ i $\langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle \equiv \overline{(\Delta B)^2}$, možemo pisati zadnju jednačinu kao

$$\frac{\bar{C}}{(\Delta A)^2} \left[\alpha + \frac{\bar{C}}{2(\Delta A)^2} \right]^2 + \frac{(\bar{C})^2}{(\Delta B)^2} - \frac{(\bar{C})^2}{4(\Delta A)^2} \geq 0. \quad (2.60)$$

Kako ovo vrijedi za svako realno α , imamo

$$\frac{(\bar{C})^2}{(\Delta B)^2} - \frac{(\bar{C})^2}{4(\Delta A)^2} \geq 0 \quad \text{ili} \quad \frac{(\bar{C})^2}{(\Delta A)^2} \frac{(\bar{C})^2}{(\Delta B)^2} \geq \frac{(\bar{C})^2}{4}. \quad (2.61)$$

Ovo je *Heisenbergov princip neodređenosti* u najopštijem obliku. Očito da on vrijedi za sve fizikalne veličine sa nekomutirajućim operatorima. Za komutirajuće operatore ($\hat{C} = 0$) nemamo relaciju neodređenosti za odgovarajuće fizikalne veličine, tako da se one mogu istovremeno tačno mjeriti. Iz gornje relacije i jednačine $[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar$ slijedi da relacija neodređenosti za ove veličine glasi $\overline{(\Delta p_x)^2} \overline{(\Delta x)^2} \geq \hbar^2/4$, što odgovara ranije dobijenom rezultatu. Kasnije ćemo pokazati da je operator energije $\hat{E} = i\hbar\partial/\partial t$ i da vrijedi relacija

$$[\hat{E}, t]_- = i\hbar. \quad (2.62)$$

Dakle vrijedi slijedeća relacija neodređenosti između energije i vremena:

$$\overline{(\Delta E)^2} \overline{(\Delta t)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (2.63)$$

Za moment impulsa dobijamo sličan rezultat, kao što ćemo vidjeti u idućem odjeljku.

2.8 Operatori momenta impulsa

Želimo izvesti izraz za operator momenta impulsa. Kako bismo ovo uradili ubacujemo operatore $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$ u klasičnu definiciju momenta impulsa $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, i dobijamo operatorsku jednačinu

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla).$$

Izražavanjem vektorskog proizvoda u Descartesovim koordinatama dobijamo:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (2.64)$$

Kako su faktori u gore navedenim proizvodima svi komutirajući hermitski operatori, operator $\hat{\mathbf{L}}$ je također hermitski. Direktnim računom mogu se izvesti slijedeće komutacione relacije za komponente operatora momenta impulsa:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x &= i\hbar \hat{L}_z, & \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y &= i\hbar \hat{L}_x, \\ \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z &= i\hbar \hat{L}_y, \end{aligned} \quad (2.65)$$

što se često piše kraće kao

$$\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} = i\hbar \hat{\mathbf{L}} \quad \text{ili} \quad [\hat{L}_i, \hat{L}_j]_- = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k, \quad (2.66)$$

gdje je ε_{ijk} potpuno antisimetrični (trodimenzionalni) tenzor, tj.

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{ako su } i, j, k \text{ parna permutacija } 1, 2, 3 \\ -1 & \text{ako su } i, j, k \text{ neparna permutacije } 1, 2, 3 \\ 0 & \text{ako su dva ili tri indeksa jednaka.} \end{cases} \quad (2.67)$$

Provjerimo npr. prvu relaciju u (2.65). Vrijedi

$$\begin{aligned} \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x &= (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) - (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z)(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) \\ &= y(\hat{p}_z z)\hat{p}_x + yz\hat{p}_z\hat{p}_x - yx\hat{p}_z^2 - z^2\hat{p}_y\hat{p}_x + zx\hat{p}_y\hat{p}_z \\ &\quad - zy\hat{p}_x\hat{p}_z + z^2\hat{p}_x\hat{p}_y + xy\hat{p}_z^2 - x(\hat{p}_z z)\hat{p}_y - xz\hat{p}_z\hat{p}_y \\ &= -i\hbar y\hat{p}_x + i\hbar x\hat{p}_y = i\hbar(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = i\hbar \hat{L}_z. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Pri tome su se poništili svi članovi osim prvog člana u drugom redu i četvrtog člana u trećem redu. Komponente momenta impulsa nisu istovremeno mjerljive, jer su relacije (2.65) oblika (2.53) sa ostatkom komutiranja različitim od nule.

Kvadrat operatora ugaonog momenta je

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \quad (2.69)$$

On komutira sa svim komponentama operatora ugaonog momenta, tj.

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x]_- = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_y]_- = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z]_- = 0. \quad (2.70)$$

Provjerimo to za prvi komutator. Vrijedi

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x]_- = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_x]_- = [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x]_- + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x]_- \quad (2.71)$$

Koristeći relaciju (2.65), prvi komutator na desnoj strani u (2.71) se može napisati kao

$$\begin{aligned} \hat{L}_y^2 \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_y^2 &= \hat{L}_y(\hat{L}_y \hat{L}_x) - \hat{L}_x \hat{L}_y^2 = \hat{L}_y(-i\hbar \hat{L}_z + \hat{L}_x \hat{L}_y) - \hat{L}_x \hat{L}_y^2 \\ &= -i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_z + (\hat{L}_y \hat{L}_x) \hat{L}_y - \hat{L}_x \hat{L}_y^2 \\ &= -i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_z + (-i\hbar \hat{L}_z + \hat{L}_x \hat{L}_y) \hat{L}_y - \hat{L}_x \hat{L}_y^2 \\ &= -i\hbar(\hat{L}_y \hat{L}_z + \hat{L}_z \hat{L}_y). \end{aligned} \quad (2.72)$$

Analogno, za drugi član se dobija

$$\begin{aligned}
 \hat{L}_z^2 \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z^2 &= \hat{L}_z(\hat{L}_z \hat{L}_x) - \hat{L}_x \hat{L}_z^2 = \hat{L}_z(i\hbar \hat{L}_y + \hat{L}_x \hat{L}_z) - \hat{L}_x \hat{L}_z^2 \\
 &= i\hbar \hat{L}_z \hat{L}_y + (\hat{L}_z \hat{L}_x) \hat{L}_z - \hat{L}_x \hat{L}_z^2 \\
 &= i\hbar \hat{L}_z \hat{L}_y + (i\hbar \hat{L}_y + \hat{L}_x \hat{L}_z) \hat{L}_z - \hat{L}_x \hat{L}_z^2 \\
 &= i\hbar (\hat{L}_z \hat{L}_y + \hat{L}_y \hat{L}_z).
 \end{aligned} \tag{2.73}$$

Suma ova dva člana, (2.72) i (2.73), je jednaka nuli, tako da je $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = 0$. Slično se može dokazati i druga i treća relacija u (2.70).

Pogodno je napisati operator momenta impulsa u sfernim koordinatama. Transformacijom

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi, \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi, \quad z = r \cos \vartheta, \tag{2.74}$$

za komponente operatora momenta impulsa u Descartesovim koordinatama dobijamo:

$$\begin{aligned}
 \hat{L}_x &= i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \varphi}{\operatorname{tg} \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\
 \hat{L}_y &= i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\sin \varphi}{\operatorname{tg} \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\
 \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}.
 \end{aligned} \tag{2.75}$$

Vrijede slijedeće relacije:

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2, \quad \cos \vartheta = \frac{z}{r}, \quad \operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x}, \tag{2.76}$$

na osnovu kojih je:

$$\begin{aligned}
 \hat{L}_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \left\{ r \sin \vartheta \cos \varphi \left[\frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \vartheta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \right. \\
 &\quad \left. - r \sin \vartheta \sin \varphi \left[\frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \vartheta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \right\} \\
 &= -i\hbar r \sin \vartheta \left\{ \cos \varphi \left[\sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \right. \\
 &\quad \left. - \sin \varphi \left[\sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \right\} \\
 &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi},
 \end{aligned} \tag{2.77}$$

i

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{L}}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \\
 &= -\hbar^2 \left[(\sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi) \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{ctg}^2 \vartheta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \\
 &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta, \varphi}, \quad (2.78)
 \end{aligned}$$

gdje $\Delta_{\vartheta, \varphi}$ označava onaj dio Laplaceovog operatora koji djeluje samo na varijable ϑ i φ . U ovom kontekstu također uvodimo i vlastite funkcije Y_{lm} operatora \hat{L}^2 pomoću relacije

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = L^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (2.79a)$$

Funkcije $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ su *sferni harmonici*, sa kojima smo se upoznali u elektrodinamici. Oni su u vezi sa Legendreovim polinomima preko relacije

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}. \quad (2.80)$$

Legendreovi polinomi se mogu definisati kao

$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - 1)^l, \quad (2.81)$$

gdje je $l \geq m \geq -l$.

U jednačini za vlastite vrijednosti (2.79a), veličina L^2 se može izraziti preko l :

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.82)$$

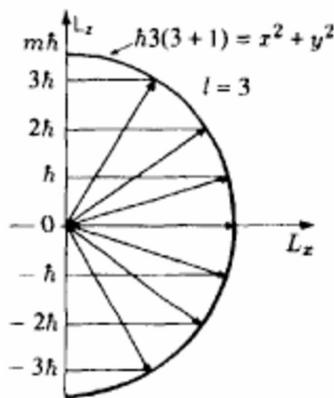
tako da jednačina (2.79a) postaje

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (2.79b)$$

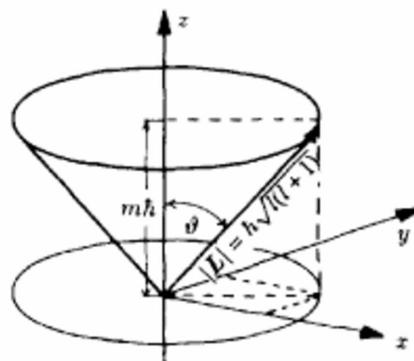
Izborom pogodnog koordinatnog sistema, data je prednost z komponenti momenta impulsa. Naime, na osnovu relacija (2.77) i (2.80) dobija se da su sferni harmonici Y_{lm} također vlastite funkcije operatora \hat{L}_z :

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l. \quad (2.84)$$

Očito je da je *spektar* operatora $\hat{\mathbf{L}}^2$ i \hat{L}_z uvek *diskretan*. Pošto operatori $\hat{\mathbf{L}}^2$ i \hat{L}_z komutiraju, njima odgovarajuće fizikalne veličine se mogu istovremeno mjeriti. Simultane vlastite funkcije su $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. Svaka vlastita vrijednost $\hbar^2 l(l+1)$ operatora $\hat{\mathbf{L}}^2$ je $(2l+1)$ -struko degenerisana zato što za svaki l



Slika 2.3: Kvantni brojevi $m\hbar$ karakteriziraju kvantizaciju z komponente momenta impulsa. U tom kontekstu se ponekad govori o “kvantizaciji smjera”.



Slika 2.4: “Oštar” moment impulsa L , i njegova z komponenta. Komponente L_x i L_y nisu oštore. U vlastitom stanju operatora \hat{L}^2 i \hat{L}_z vektor \mathbf{L} vrši precesiju oko z ose.

postoji $2l + 1$ vlastitih funkcija Y_{lm} ($l \geq m \geq -l$). Zaista, iz relacija (2.80) i (2.84) možemo dobiti z projekciju momenta impulsa \mathbf{L} sa absolutnom vrijednošću $\hbar\sqrt{l(l+1)}$. Ona poprima $2l + 1$ različitih vrijednosti $m\hbar$. Ovo je ilustrovano na slici 2.3. Ugao između momenta impulsa i smjera kvantizacije (npr. definisanog slabim magnetnim poljem) može imati samo tačno određene vrijednosti:

$$\cos \vartheta = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}. \quad (2.85)$$

Ovo se nekada naziva *smjer kvantizacije* i ne znači ništa više nego kvantizaciju z komponente momenta impulsa, tj. \hat{L}_z . Tako dobijeni rezultati se mogu interpretirati na slikovit način (pogledati sliku 2.4); vektor momenta

impulsa \mathbf{L} vrši precesiju na konusu (kupi) oko smjera kvantizacije (z ose). Kao rezultat, x i y komponente momenta impulsa nisu konstante u vremenu. Ovo ilustrira relaciju neodređenosti između L_z i L_x i između L_z i L_y .

2.9 Kinetička energija

Operator kinetičke energije u Descartesovim koordinatama dobijamo analogijom iz $T = \mathbf{p}^2/(2m)$ kao

$$\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta. \quad (2.86)$$

U polarnim koordinatama je:

$$\begin{aligned} \hat{T} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\vartheta,\varphi} \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \Delta_{\vartheta,\varphi} \\ &= \hat{T}_r + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2}. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Ovdje se operator \hat{T}_r može interpretirati kao operator kinetičke energije za kretanje u radijalnom smjeru, a $\hat{\mathbf{L}}^2/(2mr^2)$ kao operator kinetičke energije za rotaciono kretanje. Iz gornje relacije odmah slijedi da je $[\hat{T}, \hat{\mathbf{L}}^2]_- = 0$, tako da se kinetička energija i kvadrat momenta impulsa mogu istovremeno mjeriti.

2.10 Ukupna (totalna) energija

Analogno Hamiltonovoj funkciji u klasičnoj mehanici, definišemo *Hamiltonov operator* ili *hamiltonijan* kao operator ukupne (totalna) energije:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \equiv \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}). \quad (2.88)$$

Ako uzmemo zdravo za gotovo da je potencijalna energija samo funkcija udaljenosti, tj. $\hat{V} = V(r)$ (centralni potencijal), tada imamo $[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0$. Dakle, kvadrat momenta impulsa i ukupna energija mogu se mjeriti istovremeno. Isto tako, vrijedi $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$.

Pošto operatori $\hat{T} = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m)$ i $\hat{V} = V(r)$ ne komutiraju, ne možemo ništa tvrditi o tačnim vrijednostima potencijalne i kinetičke energije, čak i ako znamo ukupnu energiju. Za srednje vrijednosti ovih veličina vrijedi takozvani virijalni teorem $\langle T \rangle = \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle$, čiji dokaz za sada izostavljamo.

2.11 Vlastiti diferencijali i normiranje vlastitih funkcija za kontinuirane spekture

Počinjemo našu diskusiju sa jednačinom za vlastite vrijednosti

$$\hat{L}\psi(x, L) = L\psi(x, L), \quad (2.89)$$

koja bi trebala da ima i kontinuiran spektar sa vlastitim vrijednostima L i vlastitim funkcijama $\psi(x, L)$. Integrirajući (2.89) po L u malom intervalu ΔL dobijamo

$$\hat{L}\Delta\psi(x, L) = \int_L^{L+\Delta L} \tilde{L}\psi(x, \tilde{L})d\tilde{L}, \quad (2.90)$$

gdje se

$$\Delta\psi(x, L) = \int_L^{L+\Delta L} \psi(x, \tilde{L})d\tilde{L} \quad (2.91)$$

naziva *vlastiti diferencijal operatora* \hat{L} . Vlastite diferencijale je uveo poznati njemački matematičar Hermann Weyl (1885.–1955.). Pokazat ćemo da su vlastiti diferencijali $\Delta\psi(x, L)$, za razliku od funkcija $\psi(x, L)$, ortogonalni. Također ćemo pokazati da se veličine $\Delta\psi(x, L)$ mogu i normirati jer su konačne u prostoru. Tada, u graničnom slučaju $\Delta L \rightarrow 0$, i normiranje funkcija $\psi(x, L)$ ima smisla: radi se o tzv. normiranju na delta (δ) funkciju.

Da bismo dokazali gore navedene tvrdnje, počet ćemo tako što kompleksno konjugiramo izraze (2.89) i (2.90):

$$\hat{L}^*\psi^*(x, L') = L'\psi^*(x, L'), \quad (2.92)$$

$$\hat{L}^*\Delta\psi^*(x, L') = \int_{L'}^{L'+\Delta L'} \tilde{L}'\psi^*(x, \tilde{L}')d\tilde{L}'. \quad (2.93)$$

Tu smo preimenovali kontinuiranu vlastitu vrijednost u L' . Množenjem (2.90) sa $\Delta\psi^*(x, L')$, i (2.93) sa $\Delta\psi(x, L)$, te naknadnim oduzimanjem dobijenih relacija, nalazimo da je

$$\begin{aligned} & \int dx [\Delta\psi^*(x, L')\hat{L}\Delta\psi(x, L) - \Delta\psi(x, L)\hat{L}^*\Delta\psi^*(x, L')] \\ &= \int dx \int_L^{L+\Delta L} d\tilde{L} \int_{L'}^{L'+\Delta L'} d\tilde{L}' (\tilde{L} - \tilde{L}') \psi^*(x, \tilde{L}') \psi(x, \tilde{L}). \end{aligned}$$

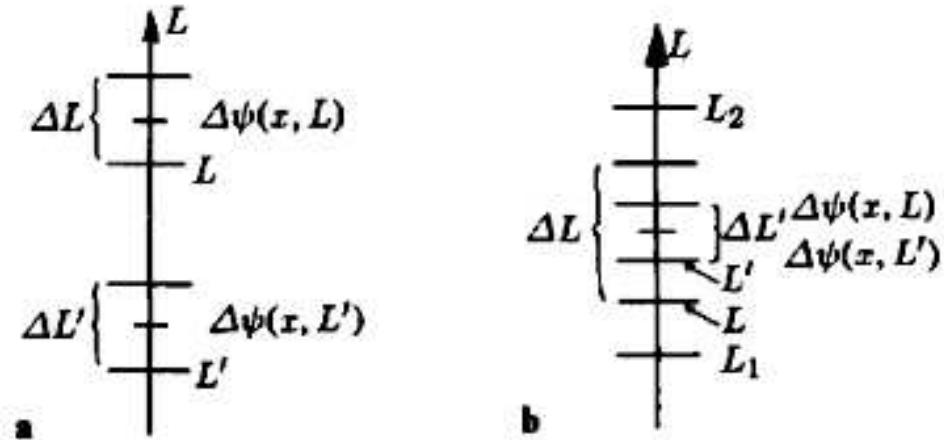
Pošto je \hat{L} hermitski operator, lijeva strana gornje jednačine je jednaka nuli. Kako bi intervali ΔL i $\Delta L'$ trebali biti mali, $\tilde{L} - \tilde{L}' \approx L - L'$ možemo

izvući ispred trostrukog integrala, koristeći se teoremom srednje vrijednosti integralnog računa, i dobiti

$$(L - L') \int dx \Delta\psi^*(x, L') \Delta\psi(x, L) = 0. \quad (2.94)$$

Tamo gdje se intervali ΔL i $\Delta L'$ ne preklapaju (vidjeti sliku 2.5), vrijedi da je $L \neq L'$, i iz (2.94) slijedi *ortogonalnost vlastitih diferencijala*:

$$\int dx \Delta\psi^*(x, L) \Delta\psi(x, L') = 0 \quad \text{za } L \neq L'. \quad (2.95)$$



Slika 2.5: Nepreklopajući (a) i preklapajući (b) intervali u spektru vlastitih vrijednosti.

Situacija je drugačija kada se intervali ΔL i $\Delta L'$ preklapaju (vidjeti sliku 2.5). Pokažimo prvo da je integral

$$N = \int dx \Delta\psi^*(x, L) \Delta\psi(x, L) \quad (2.96)$$

mali, reda veličine ΔL . U tu svrhu, napišimo (2.96) kao:

$$\begin{aligned} N &= \int dx \Delta\psi^*(x, L) \int_L^{L+\Delta L} \psi(x, \tilde{L}) d\tilde{L} \\ &= \int dx \Delta\psi^*(x, L) \int_{L_1}^{L_2} \psi(x, \tilde{L}) d\tilde{L}, \end{aligned} \quad (2.97)$$

gdje su L_1 i L_2 izabrani na takav način da je interval $(L, L + \Delta L)$ lociran unutar intervala (L_1, L_2) (vidjeti sliku 2.5). Kao posljedica relacije ortogonalnosti (2.95), doprinosi intervala (L_1, L) i $(L + \Delta L, L_2)$ cijelom intervalu (L_1, L_2) su jednaki nuli, što je iskorišteno u zadnjem koraku u relaciji (2.97). Ako pustimo da ΔL teži nuli, postaje očito da N teži nuli kao $\Delta\psi^*(x, L)$ i, prema tome, N je proporcionalno sa ΔL . Dakle, odgovarajućim (pogodnim) normiranjem $\Delta\psi(x, L)$ uvijek možemo postići da je

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{N}{\Delta L} = 1, \quad (2.98)$$

tj. $\int dx \Delta\psi^*(x, L) \Delta\psi(x, L) = \Delta L$ za $\Delta L \rightarrow 0$.

Sada kombinujemo rezultate (2.95) i (2.98) u slijedeći *uslov ortogonalnosti za vlastite diferencijale*:

$$\int dx \Delta\psi^*(x, L') \Delta\psi(x, L) = \begin{cases} \Delta L & \text{za preklapajuće intervale} \\ & (L, L + \Delta L) \text{ i } (L', L' + \Delta L'), \\ 0 & \text{za intervale } (L, L + \Delta L) \text{ i} \\ & (L', L' + \Delta L') \text{ koji se ne preklapaju.} \end{cases}$$

Ovo dozvoljava daljnju transformaciju za male ΔL , tj.

$$\begin{aligned} \int dx \Delta\psi^*(x, L') \Delta\psi(x, L) &= \int dx \Delta\psi^*(x, L') \int_L^{L+\Delta L} \psi(x, \tilde{L}) d\tilde{L} \\ &= \int dx \Delta\psi^*(x, L') \psi(x, L) \Delta L = \begin{cases} \Delta L & \text{za intervale koji se preklapaju,} \\ 0 & \text{za intervale koji se ne preklapaju.} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.99)$$

Nakon dijeljenja sa ΔL , ovo postaje

$$\int dx \Delta\psi^*(x, L') \psi(x, L) = \begin{cases} 1 & \text{ako } L' = L \text{ leži unutar intervala } (L', L' + \Delta L'), \\ 0 & \text{ako } L \text{ ne leži unutar intervala } (L', L' + \Delta L'). \end{cases}$$

Ovo se može napisati i kao

$$\int_{L'}^{L'+\Delta L'} d\tilde{L}' \int dx \psi^*(x, \tilde{L}') \psi(x, L) = \begin{cases} 1 & \text{ako je } L = L' \text{ za } \Delta L' \rightarrow 0, \\ 0 & \text{ako je } L \neq L' \text{ za } \Delta L' \rightarrow 0. \end{cases} \quad (2.100)$$

Očito je da je izraz

$$\int dx \psi^*(x, L') \psi(x, L) = \delta(L - L') \quad (2.101)$$

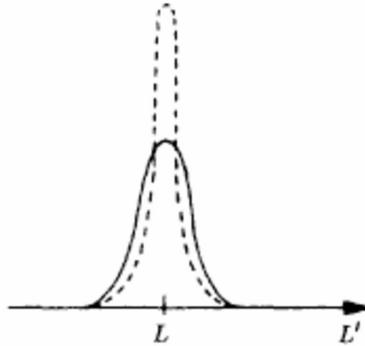
Diracova *delta funkcija*, koja nam je poznata iz elektrodinamike, i za koju, prema (2.100), vrijedi

$$\int_{L'}^{L'+\Delta L'} d\tilde{L}' \delta(L - \tilde{L}') = \begin{cases} 1 & \text{ako } L \text{ leži unutar intervala } \Delta L', \\ 0 & \text{ako } L \text{ ne leži unutar intervala } \Delta L'. \end{cases} \quad (2.102)$$

Iz ove relacije, odmah dobijamo poznatu osobinu

$$\int_a^b f(\tilde{L}') \delta(L - \tilde{L}') d\tilde{L}' = \begin{cases} f(L) & \text{ako je } L \text{ unutar intervala } (a, b), \\ 0 & \text{ako je } L \text{ izvan intervala } (a, b). \end{cases} \quad (2.103)$$

Naime, prema (2.102), $\delta(L - \tilde{L}')$, kao funkcija \tilde{L}' , mora biti lokalizovana oko vrijednosti L , tako da za integral $\int_{L'}^{L'+\Delta L'} \dots d\tilde{L}'$ oko L uvijek da vrijednost jedan (vidjeti sliku 2.6).



Slika 2.6: Dvije funkcije koje aproksimiraju funkciju $\delta(L - \tilde{L}')$.

Normiranje (2.101) za funkcije $\psi(x, L)$ kontinuiranog spektra je dobijeno tako što se pošlo od normiranja vlastitih diferencijala (2.11). Umjesto da govorimo o ortonormiranoosti vlastitih diferencijala, možemo, prema (2.101), reći: *funkcije $\psi(x, L)$ kontinuiranog spektra su normirane na δ funkciju.* Dakle, ovo normiranje na δ funkciju u kontinuiranom spektru tačno odgovara normiranju na Kroneckerove simbole $\delta_{\mu\nu}$ u slučaju diskretnog spektra.

2.12 Razvoj po vlastitim funkcijama

Pravimo matematičku *prepostavku* da sve vlastite funkcije operatora \hat{L} , koje nazivamo $\psi_n(x)$ i koje odgovaraju vlastitim vrijednostima L_n , čine *potpun (kompletan) skup funkcija*. Pod ovim mislimo da se svaka proizvoljna funkcija $\psi(x)$ može razviti po vlastitim funkcijama $\psi_n(x)$:

$$\psi(x) = \sum_n a_n \psi_n(x). \quad (2.104)$$

Koristeći ortonormiranost funkcija ψ_n , $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$, lako možemo odrediti koeficijente razvoja a_n . Množeći obje strane (2.104) sa $\psi_m^*(x)$ i integrirajući po x dobijamo

$$\int \psi(x) \psi_m^*(x) dx = \sum_n a_n \int \psi_n(x) \psi_m^*(x) dx = \sum_n a_n \delta_{nm} = a_m. \quad (2.105)$$

Na osnovu analogije između razvoja (2.104) i razvoja vektora \mathbf{A} po ortonormiranoj bazi sa baznim vektorima \mathbf{e}_i , $\mathbf{A} = \sum_i a_i \mathbf{e}_i$, koeficijenti razvoja a_n u (2.104) se mogu interpretirati kao komponente vektora (stanja) ψ u bazi ψ_n . Ako uvrstimo (2.105) u (2.104), dobijamo

$$\psi(x) = \sum_n \left(\int \psi(x') \psi_n^*(x') dx' \right) \psi_n(x) = \int \left(\sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x) \right) \psi(x') dx'. \quad (2.106)$$

Da bi ovaj identitet vrijedio za svaku proizvoljnu funkciju $\psi(x)$, očito mora da vrijedi relacija

$$\sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x) = \delta(x - x'). \quad (2.107)$$

Ovo je takozvana *relacija zatvorenosti*, koja također direktno slijedi iz razvoja δ funkcije po $\psi_n(x)$:

$$\delta(x - x') = \sum_n a_n \psi_n(x), \quad a_n = \int \psi_n^* \delta(x - x') dx = \psi_n^*(x'),$$

tako da je

$$\delta(x - x') = \sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x).$$

Ako se singularna funkcija $\delta(x - x')$ može razviti po skupu funkcija $\psi_n(x)$, onda je taj skup kompletan (ili zatvoren). Odatle i potiče naziv "relacija zatvorenosti".

2.13 Zadaci

Zadatak 2.1.

- (a) Pokazati da je operator x komponente impulsa $\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$ hermitski operator.
- (b) Pokazati da je očekivana vrijednost operatora \hat{p}_y realna.

Rješenje: (a) Operator impulsa je očito linearan operator jer je:

$$\hat{p}_x(\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2) = \alpha_1\hat{p}_x\psi_1 + \alpha_2\hat{p}_x\psi_2.$$

On će biti i hermitski ako za proizvoljne kvadratično-integrabilne funkcije ψ_1 i ψ_2 vrijedi:

$$\int \psi_1^* \hat{p}_x \psi_2 dV = \int (\hat{p}_x \psi_1)^* \psi_2 dV.$$

Ovdje je $dV = dx dy dz$ i koristili smo definiciju (1.4.3). Provjeru gornje relacije izvršit ćemo tako što ćemo primijeniti parcijalnu integraciju po x : $u = \psi_1^*$, $du = (\partial\psi_1^*/\partial x)dx$, $dv = (\partial\psi_2/\partial x)dx$, $v = \psi_2$. Vrijedi:

$$\begin{aligned} \int \psi_1^* \hat{p}_x \psi_2 dV &= \int dy dz \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_2 = \\ &= -i\hbar \int dy dz [\psi_1^* \psi_2]_{x=-\infty}^{x=+\infty} + i\hbar \int dy dz \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_2 \frac{\partial \psi_1^*}{\partial x}. \end{aligned}$$

Pošto su ψ_1 i ψ_2 kvadratično-integrabilne funkcije koje teže nuli na granicama područja integriranja, prvi član na desnoj strani u gornjoj relaciji je jednak nuli. Koristeći relaciju $i\hbar \partial \psi_1^* / \partial x = (-i\hbar \partial \psi_1 / \partial x)^*$, drugi član se može prepisati kao $\int (\hat{p}_x \psi_1)^* \psi_2 dV$, čime je dokazano da je operator \hat{p}_x hermitski.

(b) Analogno kao pod (a) pokazuje se da je operator $\hat{p}_y = -i\hbar \partial / \partial y$ hermitski i da za proizvoljnu kvadratično-integrabilnu funkciju ψ vrijedi:

$$\bar{p}_y = \int \psi^* \hat{p}_y \psi dV = \int (\hat{p}_y \psi)^* \psi dV = \left[\int \psi^* (\hat{p}_y \psi) dV \right]^* = \bar{p}_y^*,$$

tj. očekivana vrijednost operatora \hat{p}_y je realna.

Zadatak 2.2. Odrediti komutator operatora impulsa i položaja $[\hat{p}_x, \hat{x}]$.

Rješenje: Za proizvoljnu funkciju ψ vrijedi

$$\hat{p}_x \hat{x} \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) = -i\hbar \left(\psi \frac{\partial x}{\partial x} + x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = -i\hbar \left(\psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right),$$

i

$$\hat{x} \hat{p}_x \psi = x \left(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x},$$

tako da je

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] \psi = (\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x) \psi = -i\hbar \left(\psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} = -i\hbar \psi.$$

Pošto je ψ proizvoljna funkcija to vrijedi operatorska jednakost:

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar.$$

Zadatak 2.3. Neka su \hat{L} , \hat{L}_1 , \hat{L}_2 , \hat{L}_3 i \hat{M} linearni operatori u kompleksnom linearnom prostoru. Neka je \hat{E} jedinični operator a $\hat{0}$ nul-operator u tome prostoru i neka je a proizvoljni skalar. Ako je komutator operatora \hat{L} i \hat{M} definisan sa $[\hat{L}, \hat{M}] \equiv [\hat{L}, \hat{M}]_- \equiv \hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}$, dokazati slijedeće relacije:

$$[\hat{L}, \hat{M}] = -[\hat{M}, \hat{L}], \quad (2.108)$$

$$[\hat{L}, \hat{L}] = \hat{0}, \quad (2.109)$$

$$[\hat{L}, a\hat{M}] = a[\hat{L}, \hat{M}], \quad (2.110)$$

$$[\hat{L}, a\hat{E}] = \hat{0}, \quad (2.111)$$

$$[\hat{L}_1 + \hat{L}_2, \hat{M}] = [\hat{L}_1, \hat{M}] + [\hat{L}_2, \hat{M}], \quad (2.112)$$

$$[\hat{L}_1\hat{L}_2, \hat{M}] = [\hat{L}_1, \hat{M}]\hat{L}_2 + \hat{L}_1[\hat{L}_2, \hat{M}], \quad (2.113)$$

$$[\hat{M}, \hat{L}_1\hat{L}_2] = [\hat{M}, \hat{L}_1]\hat{L}_2 + \hat{L}_1[\hat{M}, \hat{L}_2], \quad (2.114)$$

$$[\hat{L}_1, [\hat{L}_2, \hat{L}_3]] + [\hat{L}_2, [\hat{L}_3, \hat{L}_1]] + [\hat{L}_3, [\hat{L}_1, \hat{L}_2]] = \hat{0}. \quad (2.115)$$

Rješenje: Prvih pet relacija su trivijalne i njihov dokaz slijedi direktno iz definicije komutatora. Dokazat ćemo sada relacije (2.113)–(2.115).

$$\begin{aligned} & [\hat{L}_1\hat{L}_2, \hat{M}] = \hat{L}_1\hat{L}_2\hat{M} - \hat{M}\hat{L}_1\hat{L}_2 = \left| \text{dodajemo i oduzimamo } \hat{L}_1\hat{M}\hat{L}_2 \right| \\ & = \hat{L}_1\hat{M}\hat{L}_2 - \hat{M}\hat{L}_1\hat{L}_2 + \hat{L}_1\hat{L}_2\hat{M} - \hat{L}_1\hat{M}\hat{L}_2 = [\hat{L}_1, \hat{M}]\hat{L}_2 + \hat{L}_1[\hat{L}_2, \hat{M}] \Rightarrow (2.113), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\hat{M}, \hat{L}_1\hat{L}_2] &= -[\hat{L}_1\hat{L}_2, \hat{M}] = |\text{koristimo (2.113)}| = -[\hat{L}_1, \hat{M}]\hat{L}_2 - \hat{L}_1[\hat{L}_2, \hat{M}] \\ &\quad |\text{koristimo (2.108)}| = [\hat{M}, \hat{L}_1]\hat{L}_2 + \hat{L}_1[\hat{M}, \hat{L}_2] \Rightarrow (2.114), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_1, [\hat{L}_2, \hat{L}_3]] &= [\hat{L}_1, \hat{L}_2\hat{L}_3] - [\hat{L}_1, \hat{L}_3\hat{L}_2] = |\text{koristimo (2.114)}| \\ &= [\hat{L}_1, \hat{L}_2]\hat{L}_3 + \hat{L}_2[\hat{L}_1, \hat{L}_3] - [\hat{L}_1, \hat{L}_3]\hat{L}_2 - \hat{L}_3[\hat{L}_1, \hat{L}_2] \\ &= -[\hat{L}_3, [\hat{L}_1, \hat{L}_2]] - [\hat{L}_2, [\hat{L}_3, \hat{L}_1]], \end{aligned}$$

odakle se dobija (2.115). Ova jednačina je poznata i kao Jacobijev identitet.

Zadatak 2.4. Odrediti vlastite funkcije $\psi_{p_x}(x)$ operatora impulsa \hat{p}_x .

Rješenje: Jednačina za određivanje vlastitih vrijednosti operatora impulsa glasi

$$\hat{p}_x \psi_{p_x}(x) = p_x \psi_{p_x}(x),$$

tj.

$$-i\hbar \frac{d\psi_{p_x}(x)}{dx} = p_x \psi_{p_x}(x),$$

odakle dobijamo slijedeću jednačinu

$$\frac{d\psi_{p_x}(x)}{\psi_{p_x}(x)} = i \frac{p_x}{\hbar} dx.$$

Integriranjem ove jednačine zaključujemo da za svako p_x ($-\infty < p_x < \infty$) vrijedi

$$\psi_{p_x}(x) = C \exp\left(i \frac{p_x}{\hbar} dx\right) = \left|k_x = \frac{p_x}{\hbar}\right| = Ce^{ik_xx},$$

gdje je C konstanta koju ćemo odrediti kasnije. Spektar impulsa je kontinuiran ($-\infty < p_x < \infty$) i za svaku vlastitu vrijednost impulsa p_x postoji vlastita funkcija ψ_{p_x} koja ustvari predstavlja ravnitalas koji se kreće u smjeru pozitivne x ose sa konstantnim impulsom p_x [uporediti i jednačinu (1.3.3) za de Broglieve talase].

Zadatak 2.5. Normirati vlastite funkcije operatora impulsa \hat{p}_x .

Rješenje. Vlastite funkcije operatora impulsa su $\psi_{p_x}(x) = C_{p_x} \exp(ip_x x / \hbar)$, gdje je C_{p_x} konstanta normiranja koju trebamo odrediti, i koja, u principu, zavisi od p_x . Spektar vlastitih vrijednosti impulsa $-\infty < p_x < \infty$ je neprekidan. Da bismo odredili C_{p_x} formirat ćemo, na osnovu (2.101), integral:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p'_x}^*(x) \psi_{p_x}(x) dx &= C_{p'_x}^* C_{p_x} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(p'_x - p_x)x/\hbar} dx \\ &= C_{p'_x}^* C_{p_x} \hbar \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-n}^n e^{-i(p'_x - p_x)x/\hbar} dx / \hbar = C_{p'_x}^* C_{p_x} \hbar \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2 \sin((p'_x - p_x)n)}{p'_x - p_x}. \end{aligned}$$

Na osnovu slijedeće osobine δ -funkcije

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sin(nx)}{\pi x} = \delta(x)$$

je

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p'_x}^*(x) \psi_{p_x}(x) dx = C_{p'_x}^* C_{p_x} 2\pi \hbar \delta(p'_x - p_x).$$

Da bismo dobili normiranje na δ -funkciju mora vrijediti $|C_{p_x}|^2 2\pi \hbar = 1$, tj., do na fazni faktor $\exp(i\varphi(p_x))$, je: $C_{p_x} = 1/\sqrt{2\pi \hbar}$. Pošto taj fazni faktor

nema nikakvog uticaja biramo ga da bude jednak jedinici. Prema tome, ortonormirane vlastite funkcije operatora impulsa su:

$$\psi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_x x\right).$$

Trodimenzionalno poopštenje tog rezultata je očito:

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) &= \psi_{p_x}(x)\psi_{p_y}(y)\psi_{p_z}(z) \\ &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(i(p_x x + p_y y + p_z z)/\hbar) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar).\end{aligned}$$

Te funkcije su normirane na slijedeći način:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p'_x}^*(x) \psi_{p_x}(x) dx \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p'_y}^*(y) \psi_{p_y}(y) dy \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p'_z}^*(z) \psi_{p_z}(z) dz = \delta(p'_x - p_x) \delta(p'_y - p_y) \delta(p'_z - p_z) = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}).\end{aligned}$$

Zadnji korak sadrži definiciju trodimenzionalne δ -funkcije.

Zadatak 2.6. Naći $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} 1/(x \pm i\varepsilon)$.

Rješenje: Poći ćemo od jednakosti

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \frac{x \mp i\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} = \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} \mp \frac{i\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}$$

i analizirati integral

$$\begin{aligned}\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x \pm i\varepsilon} dx &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} dx \mp i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} dx. \quad (2.116)\end{aligned}$$

Na osnovu jedne od reprezentacija δ -funkcije:

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{(x - x_0)^2 + \varepsilon^2},$$

za drugi član u drugom redu u relaciji (2.116) dobijamo

$$\mp i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} dx = \mp i\pi \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx = \mp i\pi f(0).$$

Prvi član u drugom redu u (2.116) se može prepisati kao

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} dx &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{-\varepsilon} f(x) \frac{dx}{x} + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\varepsilon}^{\infty} f(x) \frac{dx}{x} \\ &+ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{f(x)x}{x^2 + \varepsilon^2} dx = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x} dx + f(0) \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{xdx}{x^2 + \varepsilon^2}. \end{aligned} \quad (2.117)$$

Ovdje \mathcal{P} označava *Cauchyjevu glavnu vrijednost*

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x} dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\int_{-\infty}^{-\varepsilon} \frac{f(x)}{x} dx + \int_{\varepsilon}^{\infty} \frac{f(x)}{x} dx \right].$$

Zadnji član u (2.117) je jednak nuli zato što mu je integrand neparna funkcija (i za $\varepsilon \rightarrow 0$). Prema tome, sada možemo (2.116) pisati kao:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x \pm i\varepsilon} dx = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x} dx \mp i\pi f(0),$$

što je traženi rezultat. Ovo se može predstaviti simbolički kao često korištena formula (koja se ponekad naziva i formula Sohockog)

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x).$$

Zadatak 2.7. Pokažite da se δ -funkcija može predstaviti kao limes “krive-zvana”:

$$y(x, \varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\pi(x^2 + \varepsilon^2)} \quad (\varepsilon > 0).$$

Rješenje: Kriva-zvono postaje uža i viša sa smanjivanjem ε (vidjeti sliku sa $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$). Vrijedi:

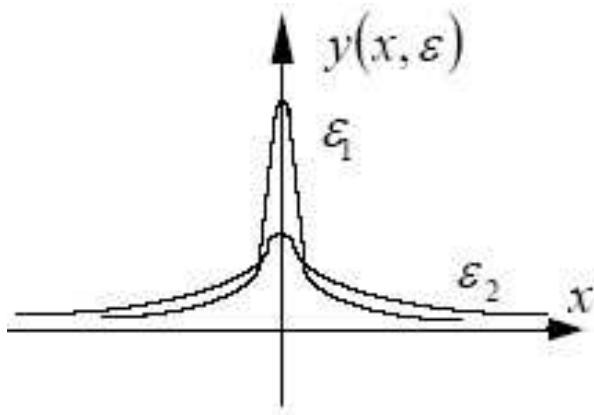
$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} y(x, \varepsilon) = \begin{cases} 0 & \text{za } x \neq 0, \\ \infty & \text{za } x = 0, \end{cases}$$

dok površina pod krivom ima uvijek vrijednost

$$\int_{-\infty}^{\infty} y(x, \varepsilon) dx = \pi^{-1} \operatorname{arctg}(x/\varepsilon) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 1,$$

nezavisno od ε . Ispitajmo sada integral

$$F(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) y(x, \varepsilon) dx,$$



Slika 2.7: Primjeri krive-zvona.

za neprekidnu, ograničenu funkciju $f(x)$, kao funkciju parametra ε . Zamjenom $x = \varepsilon\xi$ dobijamo

$$F(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\varepsilon\xi)g(\xi)d\xi,$$

gdje je

$$g(\xi) = \pi^{-1}(\xi^2 + 1)^{-1}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} g(\xi)d\xi = 1.$$

Ovaj integral uniformno konvergira [postoji $M \in \Re$ (nezavisan od ε) takav da je $|f(\varepsilon\xi)g(\xi)| \leq Mg(\xi)$]. Postoji teorem koji garantuje da je $F(\varepsilon)$ neprekidno. Odatle je $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F(\varepsilon) = F(0)$ i

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x)y(x, \varepsilon)dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F(\varepsilon) = F(0) = \int_{-\infty}^{\infty} f(0)g(\xi)d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx$$

za proizvoljnu neprekidnu ograničenu funkciju f . Prema tome, možemo pisati $\delta(x) = “\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} y(x, \varepsilon)”$. Navodnici nas podsjećaju da limes $\varepsilon \rightarrow 0$ ne treba vršiti prije integriranja test funkcije.

Poglavlje 3

Schrödingerova jednačina

U klasičnoj mehanici je moguće izračunati, na primjer, vibraciona stanja (modove) žice, membrane ili rezonatora rješavajući talasnu jednačinu uz određene granične uslove. Od samog početka razvoja kvantne mehanike postojao je problem nalaženja diferencijalne jednačine koja opisuje diskretna stanja atoma. Nije bilo moguće izvesti takvu jednačinu koristeći stare i dobro poznate fizikalne principe; umjesto toga, morale su se tražiti paralele sa klasičnom mehanikom i pokušati dedukovati željenu jednačinu i potkrepiti je opravdanim argumentima. Takva jednačina, koja nije izvedena nego intuitivno pogodjena, bi postala postulat u novoj teoriji, dok bi se njena validnost morala provjeriti eksperimentalno. Ova jednačina za proračunavanje kvantno-mehaničkih stanja se naziva **Schrödingerova jednačina**, prema austrijskom fizičaru Erwinu Schrödingeru (1887.–1961.) koji ju je prvi uveo. Mi ćemo ipak ovdje predstaviti jedan pokušaj “izvođenja” te jednačine.

U relativističkoj klasičnoj mehanici, vrijeme i prostorne koordinate, a također energija i impuls, se tretiraju kao četiri komponente četverovektora:

$$x_\nu = (\mathbf{r}, ict), \quad p_\nu = (\mathbf{p}, iE/c), \quad \nu = 1, 2, 3, 4. \quad (3.1)$$

Poopštavajući trodimenzionalni operator impulsa $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ na četverodimenzionalni relativistički operator, dobijamo

$$\left(\hat{\mathbf{p}}, i\hat{E}/c \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\nu} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}, \frac{\partial}{\partial (ict)} \right). \quad (3.2)$$

I na lijevoj i na desnoj strani u (3.2) nalaze se četverovektori. Upoređivanjem vidimo da energiji odgovara slijedeći operator:

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (3.3)$$

Sjetimo se da smo već imali jedan operator za energiju – hamiltonijan \hat{H} čestice. Očito, imamo dva operatora za energiju. I \hat{E} i hamiltonijan \hat{H} opisuju ukupnu energiju i mogu se izjednačiti. Ovo nas upravo vodi na Schrödingerovu jednačinu:

$$\begin{aligned}\hat{E}\psi(\mathbf{r}, t) &= \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t) \quad \text{ili} \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t), \\ \text{gdje je } \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (3.4)$$

Koristeći talasnu funkciju za slobodnu česticu (de Brogliev talas),

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}, t) &= A \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})\right] \\ &= A \exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{\nu} p_{\nu}x_{\nu}\right) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}p \cdot x\right),\end{aligned}\quad (3.5)$$

dobijamo da je vlastita vrijednost operatora \hat{E} upravo totalna energija E .

Treba napomenuti da Schrödingerova jednačina nije relativistička jednačina. Zaista, polazeći od izraza za relativističku energiju slobodne čestice:

$$E^2 = \mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4,\quad (3.6)$$

primjenom principa korespondencije, koji je izražen relacijom (3.2), dobijamo *Klein-Gordonovu jednačinu* za talasnu funkciju koja opisuje slobodnu česticu u relativističkoj kvantnoj mehanici

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(\mathbf{r}, t) = (-\hbar^2c^2\Delta + m^2c^4)\psi(\mathbf{r}, t).\quad (3.7)$$

Schrödingerova jednačina i Klein-Gordonova jednačina su linearne diferencijalne jednačine. To znači da, ako su ψ_1 i ψ_2 rješenja jedne od tih jednačina, tada je i funkcija definisana sa $\psi = a\psi_1 + b\psi_2$ također rješenje te jednačine. Ovo je matematička formulacija principa superpozicije. Schrödingerova jednačina je prvog reda po vremenu i drugog reda po prostoru, dok je Klein-Gordonova jednačina drugog reda i po vremenu i po prostoru. Pretpostavljamo da talasna funkcija u trenutku t_0 sadrži sve informacije o tome kako se stanje mijenja ako nema vanjskih perturbacija. Samo Schrödingerova jednačina, kao diferencijalna jednačina prvog reda po vremenu, zadovoljava ovu prepostavku. Klein-Gordonova jednačina, koja je važna u relativističkoj kvantnoj mehanici, se interpretira na drugačiji način i o tome će kasnije biti više riječi. Schrödingerova jednačina (3.4) sadrži kao faktor imaginarnu jedinicu i , što ukazuje na to da su moguća oscilatorna rješenja.

Ako hamiltonijan $\hat{H} = \hat{H}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}})$ ne zavisi eksplisitno od vremena, prostorne i vremenske koordinate u Schrödingerovoj jednačini se mogu separirati uvođenjem smjene:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})f(t),$$

gdje se $\psi(\mathbf{r}, t)$ i $\psi(\mathbf{r})$ tretiraju kao dvije različite funkcije. Schrödingerova jednačina (3.4) se tada svodi na:

$$i\hbar\psi(\mathbf{r})\frac{\partial}{\partial t}f(t) = [\hat{H}\psi(\mathbf{r})]f(t). \quad (3.8)$$

Dakle, vremenske i prostorne varijable su separirane, tako da je ($\dot{f} \equiv \partial f / \partial t$)

$$i\hbar\frac{\dot{f}(t)}{f(t)} = \frac{\hat{H}\psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})} = \text{const.} = E. \quad (3.9)$$

Rješenje diferencijalne jednačine $i\hbar\dot{f}(t) = Ef(t)$ za vremenski zavisnu funkciju $f(t)$ glasi

$$f(t) = \text{const.} \exp(-iEt/\hbar). \quad (3.10)$$

Funkcija sa prostornim argumentom $\psi(\mathbf{r})$ je rješenje *stacionarne Schrödingerove jednačine*

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (3.11)$$

Talasna funkcija $\psi(\mathbf{r}, t)$ je periodična u vremenu, sa faznim faktorom $\exp(-iEt/\hbar)$, što je razlog zašto su gustoća vjerovatnoće $\psi^*\psi$ i, kao što ćemo vidjeti kasnije, gustoća struje \mathbf{j} vremenski nezavisne. Jednačina (3.11) je jednačina za vlastite vlastite vrijednosti hamiltonijana, gdje je energija E realna vlastita vrijednost. Opšta rješenja Schrödingerove jednačine (3.4) su oscilirajuće funkcije vremena t :

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) \exp(-iE_n t/\hbar), \quad (3.12)$$

koje su normirane su na slijedeći način

$$\int \psi_n^*(\mathbf{r}, t)\psi_n(\mathbf{r}, t)dV = \int \psi_n^*(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r})dV = 1. \quad (3.13)$$

Svako stacionarno stanje odgovara dobro definisanoj energiji i neograničenoj stabilnosti u vremenu. Ima karakter stojećeg talasa zato što je gustoća vjerovatnoće data sa $\psi^*\psi$ vremenski nezavisna. Ovo ne vrijedi za linearnu superpoziciju stacionarnih stanja.

3.1 Očuvanje broja čestica u kvantnoj mehanici

U elektrodinamici važi dobro poznata jednačina neprekidnosti (relacija kontinuiteta)

$$\frac{\partial \varrho_e}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_e = 0, \quad (3.14)$$

gdje je ϱ_e gustoća naboja, a \mathbf{j}_e gustoća električne struje. Ova jednačina izražava zakon održanja električnog naboja: ako se gustoća naboja u elementu zapremine promjeni, tada električna struja prolazi kroz površinu tog elementa zapremine (Gaussov zakon).

Sada ćemo pokušati da nađemo sličnu relaciju za broj čestica u nekom elementu zapremine. Umjesto gustoće naboja razmatramo gustoću vjerovatnoće $w = \psi^* \psi$. Ako zahtjevamo da nema ni stvaranja ni anihiliranja čestica, tada vrijedi i slijedeća relacija kontinuiteta:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0. \quad (3.15)$$

Naš cilj je da nađemo izraz za gustoću struje čestica \mathbf{j} . Krenut ćemo od vremenski zavisne Schrödingerove jednačine

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \quad (3.16)$$

i njoj kompleksno-konjugovane jednačine

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H}^* \psi^*. \quad (3.17)$$

Množeći slijeva prvu jednačinu sa ψ^* a drugu sa ψ , sabiranjem tako dobijenih jednačina nalazimo da je

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \frac{i}{\hbar} (\psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H}^* \psi^*) = 0. \quad (3.18)$$

Ako pretpostavimo da je potencijal $V(\mathbf{r})$ realan i ne zavisi od brzine (odnosno od impulsa $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$), možemo pisati $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m) + V(\mathbf{r}) = \hat{H}^*$, tako da se (3.18) svodi na

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi) = 0. \quad (3.19)$$

Ispred drugog člana u zagradi možemo izvući jedan nabla operator:

$$\begin{aligned} \psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi &= \psi \nabla^2 \psi^* + \nabla \psi \nabla \psi^* - \nabla \psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi \\ &= \nabla (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi). \end{aligned}$$

Dakle, imamo

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) + \frac{i\hbar}{2m}\operatorname{div}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) = 0. \quad (3.20)$$

Ova jednačina ima oblik tražene jednačine neprekidnosti ako definišemo gustoću struje čestica na slijedeći način:

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi). \quad (3.21)$$

Primjena Gaussovog zakona

$$\int_V (\operatorname{div} \mathbf{j}) dV = \oint_F \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} dF \quad (3.22)$$

vodi na integralnu jednačinu

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \psi^*\psi dV + \oint_F j_n dF = 0. \quad (3.23)$$

Fluks čestica kroz površinu F područja (elementa zapremine V) je ekvivalentan varijaciji (promjeni) gustoće čestica unutar tog područja.

Zahtjevali smo vremenski nezavisno normiranje talasne funkcije

$$\int_V \psi^*\psi dV = 1,$$

tj. da je struja čestica koja prolazi kroz beskonačno daleku površinu jednaka nuli. Dakle, upoređujući jednačinu (3.23), zaključujemo da se na jedinicu mogu normirati samo ona stanja čiji strujni fluks kroz beskonačno daleku površinu isčeza (teži nuli). Ako hoćemo da izračunamo gustoću struje mase ili gustoću električne struje na osnovu čestične gustoće struje, jednačinu neprekidnosti moramo pomnožiti sa masom m , odnosno nabojem e , tako da su *gustoća mase i gustoća naboja* date sa

$$\varrho_m = m\psi^*\psi, \quad \varrho_e = e\psi^*\psi. \quad (3.24)$$

Prema tome, zakoni održanja također vrijede i za masu i za naboj.

Kao primjer izračunanja čestične gustoće struje, uzmimo ravnii talas $\psi = A \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$. Iz (3.21) dobijamo

$$\mathbf{j} = A^2 \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} = \psi^*\psi \frac{\mathbf{p}}{m} = w\mathbf{v}. \quad (3.25)$$

Očita je povezanost između relacija za gustoću struje čestica \mathbf{j} i brzine čestica \mathbf{v} . Naravno, u ovom slučaju struja kroz proizvoljno daleku površinu nije nula, i normiranje ravnih talasa se, umjesto na jedinicu, vrši na δ funkciju.

3.2 Stacionarna stanja

Podsjetimo se da, u slučaju kada hamiltonijan \hat{H} ne zavisi eksplisitno od vremena, možemo izvršiti separaciju varijabli x i t u vremenski nezavisnoj Schrödingerovoj jednačini

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H}\psi(x, t). \quad (3.26)$$

Smjenom $\psi_n(x, t) = \psi_n(x)f_n(t)$ dobijamo dvije diferencijalne jednačine:

$$i\hbar \frac{\partial f_n}{\partial t} = E_n f_n(t), \quad \hat{H}\psi_n(x) = E_n \psi_n(x). \quad (3.27)$$

Rješavanjem prve jednačine smo dobili vremenski faktor $f_n(t) = \exp(-iE_n t/\hbar)$, koji je normiran na takav način da je $|f_n|^2 = 1$. Druga jednačina u (3.27) je stacionarna Schrödingerova jednačina. Uvodeći oznaku $E_n = \hbar\omega_n$, za vlastitu funkciju hamiltonijana \hat{H} imamo:

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x)e^{-i\omega_n t}. \quad (3.28)$$

Opšte rješenje $\Psi(x, t)$ vremenski zavisne Schrödingerove jednačine je superpozicija svih $\psi_n(x, t)$:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \sum_n C_n(0) \psi_n(x, t) = \sum_n C_n(t) \psi_n(x), \\ \text{gdje je: } &C_n(t) = C_n(0) e^{-i\omega_n t}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Koeficijenti C_n su određeni integralom

$$C_n(0) = \int \Psi(x, 0) \psi_n^*(x, 0) dx. \quad (3.30)$$

Da bismo ovo dokazali, posmatrajmo prvo (3.29) u trenutku $t = 0$:

$$\Psi(x, 0) = \sum_n C_n(0) \psi_n(x). \quad (3.31)$$

Pomnožimo obje strane gornje jednačine sa $\psi_m^*(x)$ i integrirajmo po x . Pošto su talasne funkcije $\psi_n(x)$ ortonormirane, tj. $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{mn}$, ovo nam daje

$$\begin{aligned} \int \Psi(x, 0) \psi_m^*(x) dx &= \sum_n C_n(0) \int \psi_n(x) \psi_m^*(x) dx \\ &= \sum_n C_n(0) \delta_{nm} = C_m(0). \end{aligned}$$

Ovo je upravo rezultat (3.30). I ovdje se možemo pozvati na analogiju razvoja (3.29) i razvoja proizvoljnog vektora \mathbf{A} po ortonormiranoj bazi \mathbf{e}_i : $\mathbf{A} = \sum_i a_i \mathbf{e}_i$, gdje su komponente (koeficijenti razvoja) $a_i = \mathbf{A} \cdot \mathbf{e}_i$ skalarni proizvodi vektora \mathbf{A} sa baznim vektorima \mathbf{e}_i . Prema ovome, (3.29) možemo posmatrati kao razvoj stanja $\Psi(x, t)$ po baznim vektorima $\psi_n(x)$. Koeficijenti razvoja $C_n(t)$ su, dakle, komponente vektora stanja $\Psi(x, t)$ izraženog preko vektora baze $\psi_n(x)$.

3.3 Osobine stacionarnih stanja

Kako je vremenski faktor normiran, to je $\psi_n^*(\mathbf{r}, t)\psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n^*(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r})$. Dakle, za stacionarna stanja je gustoća vjerovatnoće konstantna u toku vremena:

$$w(\mathbf{r}, t) = w(\mathbf{r}). \quad (3.32)$$

Struja $\mathbf{j}_n(\mathbf{r}, t)$ je data sa (3.21):

$$\mathbf{j}_n(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} [\psi_n(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\nabla} \psi_n^*(\mathbf{r}, t) - \psi_n^*(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\nabla} \psi_n(\mathbf{r}, t)]. \quad (3.33)$$

Kako nabla operator ne djeluje na vremenski faktor, imamo

$$\mathbf{j}_n(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}_n(\mathbf{r}), \quad (3.34)$$

tj. struja stacionarnih stanja je također konstantna u vremenu. Sada možemo razviti $\psi_n(\mathbf{r}, t)$ po vlastitim funkcijama proizvoljnog operatora \hat{A} :

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_A C_A(t) \psi_A(\mathbf{r}).$$

Za stacionarna stanja vjerovatnoće $|C_A|^2$ nalaženja vrijednosti A opservable opisane operatorom \hat{A} su vremenski nezavisne ako \hat{A} ne zavisi eksplicitno od vremena. Naime, vrijedi

$$C_A(t) = \int \psi_A^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}, t) dV = e^{-i\omega_n t} \int \psi_A^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}) dV,$$

gdje je za $t = 0$: $C_A(0) = \int \psi_A^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}) dV$. Iz ove dvije jednačine slijedi navedena tvrdnja

$$|C_A(t)|^2 = |C_A(0)|^2. \quad (3.35)$$

3.4 Zadaci sa pismenih ispita iz kvantne mehanike

Zadatak 3.1. Elektron se slobodno kreće unutar jednodimenzionalne potencijalne Jame sa beskonačno visokim zidovima u tačkama $x = 0$ i $x = a$. Odgovarajući potencijal je $V(x) = 0$ između $x = 0$ i $x = a$, a beskonačan inače.

- a) Odrediti raspodjelu vjerovatnoća različitih vrijednosti impulsa elektrona.
- b) Provjeriti relaciju neodređenosti za taj elektron.
- c) Neka se u početku elektron nalazi u osnovnom stanju ($n = 1$). Ako se veličina Jame naglo učetverostruči, tj. desna strana zida pomjeri iz $x = a$ u $x = 4a$, izračunati vjerovatnoću da se elektron nađe u: (i) osnovnom stanju nove Jame, (ii) prvom pobuđenom stanju nove Jame.

Zadatak 3.2. Čestica mase m nalazi se pod uticajem potencijala: $V(x) = -V_0\delta(x)$, $V_0 > 0$.

- a) Naći talasnu funkciju vezanih stanja te čestice i odgovarajuću energiju $E < 0$.
- b) Izračunati koeficijent refleksije $R = |\psi_{\text{refl.}}|^2 / |\psi_{\text{upad.}}|^2|_{x=0}$ ravnog talasa na tom potencijalu.

Zadatak 3.3. Čestica mase m i energije $E = \hbar^2 k^2 / (2m) > 0$ nalijeće slijeva na jednodimenzionalnu pravougaonu potencijalnu jamu opisanu sa potencijalom:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{za } |x| > a/2 \\ -V_0 & \text{za } |x| < a/2 \end{cases}, \quad V_0 > 0.$$

Pokazati da je koeficijent transmisije dat sa:

$$T = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k}{k_2} - \frac{k_2}{k} \right)^2 \sin^2(k_2 a) \right]^{-1},$$

gdje je $k_2 = [2m(E + V_0) / \hbar^2]^{1/2}$. Diskutovati mogućnost pojave rezonantne transmisije.

Zadatak 3.4. Razmotriti česticu mase m pod uticajem potencijala:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{za } x \leq 0 \\ -V_0\delta(x - a) & \text{za } x > 0 \end{cases}.$$

gdje je $V_0 > 0$. Diskutovati mogućnost postojanja vezanih stanja u zavisnosti od veličine a .

Zadatak 3.5. Atom u blizini zida se može približno modelirati česticom mase m pod uticajem potencijala:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{za } x \leq -d \\ -V_0\delta(x) & \text{za } x > -d \end{cases},$$

gdje je $V_0 > 0$ i $d > 0$, a $\delta(x)$ je delta funkcija. Koji uslov moraju zadovoljavati veličine d i V_0 da bi postojalo bar jedno vezano stanje sistema.

Zadatak 3.6. Čestica mase m se kreće unutar jednodimenzionalne potencijalne jame sa beskonačno visokim zidovima u tačkama $x = 0$ i $x = a$. Pored toga, čestica je pod uticajem delta potencijala jačine $V_0 > 0$, tako da je:

$$V(x) = \begin{cases} V_0\delta\left(x - \frac{a}{2}\right) & \text{za } 0 < x < a \\ \infty & \text{inače} \end{cases}.$$

Izvesti transcendentalnu jednačinu za određivanje energije čestice.

Zadatak 3.7. Čestica se slobodno kreće u ravni Oyz u oblasti oblika pravougaonika: $0 \leq y \leq a$, $0 \leq z \leq b$. Ostali dio ravni Oyz je nedostupan za česticu. Pri kretanju duž ose Ox na česticu djeluje kvazileastična sila $F = -kx$. Naći talasnu funkciju i energetske nivoe čestice. Izračunati koeficijent normiranja. [Uputa: Koristiti tablični integral $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \left(\frac{\pi}{a}\right)^{\frac{1}{2}}$, $a > 0$ i relaciju $d^n H_n(\xi)/d\xi^n = 2^n n!$.]

Zadatak 3.8. Elektron se nalazi u trodimenzionalnoj kocki sa ivicom dužine a . Odgovarajući potencijal je:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{za } 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq a, 0 \leq z \leq a \\ \infty & \text{inače} \end{cases}.$$

- a) Riješiti odgovarajuću stacionarnu Schrödingerovu jednačinu, tj. odrediti talasnu funkciju i dozvoljene vrijednosti energije čestice mase m koja se nalazi pod uticajem toga potencijala.
- b) Neka je energija elektrona $3\pi^2\hbar^2/(ma^2)$. Kojim vlastitim funkcijama odgovara ta energija?

Zadatak 3.9. Čestica mase m nalazi se u jednodimenzionalnoj pravougaonoj potencijalnoj jami konačne dubine:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{za } x < -a/2 \\ -V_0 & \text{za } -a/2 < x < a/2 \\ 0 & \text{za } x > a/2 \end{cases} .$$

- a) Napisati stacionarna rješenja Schrödingerove jednačine za česticu energije $-V_0 < E < 0$ za svako od područja: I ($x < -a/2$), II ($-a/2 < x < a/2$) i III ($x > a/2$).
- b) Primjenjujući uslove neprekidnosti za talasnu funkciju i njezin izvod u tačkama $x = \pm a/2$, izvesti jednačinu za određivanje energije E vezanih stanja.
- c) Analizirati (kvalitativno) grafički dobijenu jednačinu.

Zadatak 3.10. Naći valnu funkciju i energije vezanih stanja elektrona mase m u jednodimenzionalnoj potencijalnoj jami sa potencijalom:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{za } x < 0 \\ -V_0 & \text{za } 0 < x < a \\ 0 & \text{za } x > a \end{cases} ,$$

gdje je $V_0 > 0$. Pod kojim uslovom postoji bar jedno vezano stanje?

Poglavlje 4

Harmonijski oscilator

4.1 Jednodimenzionalna Schrödingerova jednačina za harmonijski oscilator

Kao primjenu Schrödingerove jednačine sada ćemo izračunati stanja čestice u oscilatornom potencijalu. Iz klasične mehanike nam je poznato da je takav potencijal od velikog značaja, zbog toga što se mnogi komplikovani potencijali u okolini ravnotežnog položaja mogu aproksimirati harmonijskim oscilatorom. Razvijanje jednodimenzionalnog potencijala $V(x)$ u Taylorov red daje

$$\begin{aligned} V(x) &= V(a + (x - a)) \\ &= V(a) + V'(a)(x - a) + \frac{1}{2}V''(a)(x - a)^2 + \dots \end{aligned} \quad (4.1)$$

Ako u tački $x = a$ postoji stabilna ravnoteža funkcija $V(x)$ ima minimum za $x = a$, tj. $V'(a) = 0$ i $V''(a) > 0$. Možemo izabrati da nam je a ishodište koordinatnog sistema i postaviti da je $V(a) = 0$. Tada je potencijal harmonijskog oscilatora zaista prva aproksimacija za potencijal $V(x)$ u okolini tačke $x = a$, tj. u okolini ravnotežnog položaja.

Ovdje ćemo razmatrati samo jednodimenzionalni slučaj. Klasična Hamiltonova funkcija čestice mase m koja osciluje frekvencijom ω ima oblik

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2, \quad (4.2)$$

dok je odgovarajući kvantno-mehanički operator (hamiltonijan)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2. \quad (4.3)$$

Kako je potencijal konstantan u toku vremena, vremenski nezavisna (stacionarna) Schrödingerova jednačina poprima oblik

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \psi(x) = E \psi(x). \quad (4.4)$$

Zbog značaja harmonijskog oscilatora i njegovih rješenja za kvantnu mehaniku, detaljno ćemo razmotriti metodu rješavanja diferencijalne jednačine (4.4). Koristeći skraćene oznake

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad \lambda = \frac{m\omega}{\hbar}, \quad (4.5)$$

ovu diferencijalnu jednačinu možemo prepisati u obliku

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (k^2 - \lambda^2 x^2) \psi = 0. \quad (4.6)$$

Jednačina (4.6) je poznata kao *Weberova diferencijalna jednačina*. Radi daljnog pojednostavljenja uvodimo smjenu

$$y = \lambda x^2, \quad (4.7)$$

i dobijamo

$$y \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dy} + \left(\frac{\kappa}{2} - \frac{1}{4} y \right) \psi = 0, \quad (4.8)$$

gdje je

$$\kappa = \frac{k^2}{2\lambda} = \frac{\hbar k^2}{2m\omega} = \frac{E}{\hbar\omega}. \quad (4.9)$$

Pri rješavanju diferencijalne jednačine tipa (4.8) obično se razmatra ponašanje asimptotskih članova. Za $y \rightarrow \infty$ jednačina (4.8) se ponaša kao $d^2\psi/dy^2 = \psi/4$, tj. vrijedi $\psi \propto \exp(-y/2)$, tako da je logično uvesti novu smjenu

$$\psi(y) = e^{-y/2} \varphi(y). \quad (4.10)$$

Uvrštavajući (4.10) u (4.8) i koristeći relacije

$$\frac{d\psi}{dy} = \left[-\frac{1}{2} \varphi(y) + \frac{d\varphi}{dy} \right] e^{-y/2}, \quad \frac{d^2\psi}{dy^2} = \left[\frac{1}{4} \varphi(y) - \frac{d\varphi}{dy} + \frac{d^2\varphi}{dy^2} \right] e^{-y/2},$$

dobijamo slijedeću diferencijalnu jednačinu za $\varphi(y)$:

$$y \frac{d^2\varphi}{dy^2} + \left(\frac{1}{2} - y \right) \frac{d\varphi}{dy} + \left(\frac{\kappa}{2} - \frac{1}{4} \right) \varphi = 0. \quad (4.11)$$

Prije nego što dalje ispitamo jednačinu (4.11) napraviti ćemo digresiju na jednu oblast matematičke fizike – specijalne funkcije. Konkretno, u dodatku A uvedene su tzv. hipergeometrijske funkcije. Naš cilj je da shvatimo njihove osnovne matematičke osobine bez rigoroznog izvođenja koje je zato ostavljeno kao dodatak.

4.2 Rješenje Schrödingerove jednačine za harmonijski oscilator

Poredeći jednačinu (4.11) sa rezultatom (4.92) iz matematičkog dodatka o hipergeometrijskim funkcijama, prepoznajemo je kao Kummerovu diferencijalnu jednačinu. Opšte rješenje te jednačine je dano sa (4.93):

$$\varphi(y) = A {}_1F_1(a; 1/2; y) + B y^{1/2} {}_1F_1(a + 1/2; 3/2; y), \quad (4.12)$$

gdje je

$$a = -\left(\frac{\kappa}{2} - \frac{1}{4}\right). \quad (4.13)$$

Rješenje našeg fizikalnog problema je određeno talasnom funkcijom (4.10). Neophodna kvadratična integrabilnost talasne funkcije ψ implicira da ψ mora težiti nuli u beskonačnosti. Na osnovu rezultata (4.95) vidimo da se obadva partikularna rješenja za velike vrijednosti y ponašaju na slijedeći način:

$$\begin{aligned} y \rightarrow \infty : \varphi(y) &\rightarrow \text{const } e^y y^{a-1/2}, \quad \text{tj.} \\ \psi(y) &= e^{-y/2} \varphi(y) \rightarrow \text{const } e^{y/2} y^{a-1/2}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Ovo znači da integral normiranja divergira. Međutim, u matematičkom dodatku smo pokazali da se funkcija φ svodi na polinom ako je za hipergeometrijski red ispunjen uslov prekida reda: $a = -n$. U tom slučaju, zahvaljujući faktoru $\exp(-y/2)$ [vidjeti (4.14)], talasna funkcija ψ iščezava u beskonačnosti. Dakle, zahtjev da se talasna funkcija može normirati vodi na zahtjev da se hipergeometrijska funkcija svodi na polinom. Pokazat ćemo da taj zahtjev vodi na *kvantizaciju energije*. Razmotrimo sada dva moguća slučaja.

1. $a = -n$ i $B = 0$ ($n = 0, 1, 2, \dots$)

U ovom slučaju je

$$\frac{\kappa}{2} - \frac{1}{4} = n,$$

a vlastite funkcije i energije su

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\lambda x^2/2} {}_1F_1(-n; 1/2; \lambda x^2), \quad (4.15)$$

$$E_n = \hbar\omega(2n + 1/2). \quad (4.16)$$

2. $a + 1/2 = -n$ i $A = 0$ ($n = 0, 1, 2, \dots$)

U ovom slučaju je

$$\frac{\kappa}{2} - \frac{1}{4} = n + \frac{1}{2},$$

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\lambda x^2/2} x {}_1F_1(-n; 3/2; \lambda x^2), \quad (4.17)$$

$$E_n = \hbar\omega[(2n + 1) + 1/2]. \quad (4.18)$$

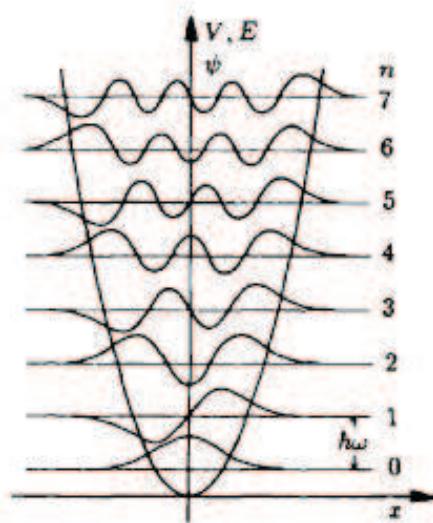
Koristeći relaciju (4.9) nalazimo slijedeće vrijednosti energije:

$$\begin{aligned} E_n &= (2n + 1/2)\hbar\omega && \text{i} \\ E_n &= (2n + 3/2)\hbar\omega = [(2n + 1) + 1/2]\hbar\omega. \end{aligned}$$

Kombinovanjem ova dva rezultata, dobijamo diskretan energetski spektar:

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots. \quad (4.19)$$

Kao što vidimo, energetski spektar harmonijskog oscilatora je ravnomjerno raspoređen (ekvidistantan) sa korakom $\hbar\omega$ i ima konačnu vrijednost u osnovnom stanju ($n = 0$) – to je tzv. *nulta energija* $\frac{1}{2}\hbar\omega$ (vidjeti sliku 4.1).



Slika 4.1: Potencijal oscilatora $V(x)$, energetski nivoi E_n , i odgovarajuće talasne funkcije ψ_n .

Polinomi u (4.15) i (4.17) su poznati kao *Hermiteovi polinomi*. Oni se, uzimajući u obzir standardni faktor normiranja, definišu kao:

$$\begin{aligned} H_{2n}(\xi) &= (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} {}_1F_1(-n; 1/2; \xi^2), \\ H_{2n-1}(\xi) &= (-1)^n \frac{2(2n+1)!}{n!} \xi {}_1F_1(-n; 3/2; \xi^2). \end{aligned} \quad (4.20)$$

4.2 Rješenje Schrödingerove jednačine za harmonijski oscilator 105

Tada se vlastite funkcije i energije (4.15)–(4.18) mogu prepisati u obliku:

1. $\psi_n(x) = N_n e^{-\lambda x^2/2} H_{2n}(\sqrt{\lambda}x), \quad E_n = (2n + 1/2)\hbar\omega,$
2. $\psi_n(x) = N_n e^{-\lambda x^2/2} H_{2n+1}(\sqrt{\lambda}x), \quad E_n = [(2n + 1) + 1/2]\hbar\omega,$

gdje je $n = 0, 1, 2, \dots$. Ovo se može ujediniti u sljedeći konačni rezultat:

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\lambda x^2/2} H_n(\sqrt{\lambda}x), \quad E_n = (n + 1/2)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.21)$$

Za Hermiteove polinome vrijedi relacija [vidjeti jednačinu (4.110) u matematičkom dodatku]

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}. \quad (4.22)$$

$H_n(\xi)$ su polinomi n -tog stepena po ξ sa dominantnim članom $2^n \xi^n$. Prvih pet polinoma dobijenih korištenjem relacije (4.22) su:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, & H_1(\xi) &= 2\xi, \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, & H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi, \\ H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12. & & \end{aligned} \quad (4.23)$$

Uvođenjem skraćene oznake $\xi = \sqrt{\lambda}x$ vlastite funkcije (4.21) se mogu prepisati u obliku

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \quad \xi = \sqrt{\lambda}x. \quad (4.24)$$

Konstanta N_n zavisi od indeksa n i određena je uslovom normiranja:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1, \quad (4.25)$$

pošto zahtjevamo da se čestica nalazi negdje u prostoru, tj. da ukupna vjerovatnoća bude jednaka 1. Dakle, treba biti

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} N_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} [H_n(\xi)]^2 d\xi = 1. \quad (4.26)$$

Koristeći relaciju (4.22) kako bismo izrazili Hermiteov polinom koji se nalazi u podintegralnoj funkciji integrala normiranja, integral u (4.26) postaje

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = (-1)^n \frac{N_n^2}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} d\xi. \quad (4.27)$$

Parcijalnom integracijom dobijamo

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} d\xi \\ = \left[\left(\frac{d^{n-1}}{d\xi^{n-1}} e^{-\xi^2} \right) H_n(\xi) \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dH_n}{d\xi} \frac{d^{n-1}}{d\xi^{n-1}} e^{-\xi^2} d\xi. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Na osnovu relacije (4.22) prvi član je jednak $(-1)^{n-1} e^{-\xi^2} H_{n-1}(\xi) H_n(\xi)$, te, zbog eksponencijalne funkcije, iščezava u beskonačnosti. Nakon n parcijalnih integracija dobijamo da vrijedi

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} d\xi = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^n H_n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} d\xi. \quad (4.29)$$

Kako je $H_n(\xi)$ polinom n -tog stepena sa dominantnim članom $2^n \xi^n$, za n -ti izvod dobijamo da vrijedi

$$\frac{d^n}{d\xi^n} H_n(\xi) = 2^n n!. \quad (4.30)$$

Iz ovoga nalazimo

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} d\xi = (-1)^n 2^n n! \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = (-1)^n 2^n n! \sqrt{\pi}, \quad (4.31)$$

dok za konstantu normiranja imamo

$$N_n = \sqrt{\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \frac{1}{2^n n!}}.$$

Stacionarna stanja harmonijskog oscilatora u kvantnoj mehanici su, do na fazni faktor $(-1)^n$, dakle

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}} \exp(-\lambda x^2/2) H_n(\sqrt{\lambda} x). \quad (4.32)$$

Da bismo prodiskutovali ovaj rezultat, pogledajmo prve tri vlastite funkcije linearног harmonijskog oscilatora (vidjeti sliku 4.1):

$$\begin{aligned} n = 0 : \quad \psi_0(x) &= \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \exp(-\lambda x^2/2). \\ n = 1 : \quad \psi_1(x) &= 2\sqrt{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \exp(-\lambda x^2/2) \sqrt{\lambda} x, \\ n = 2 : \quad \psi_2(x) &= \sqrt{\frac{1}{8}} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \exp(-\lambda x^2/2) (4\lambda x^2 - 2). \end{aligned} \quad (4.33)$$

4.2 Rješenje Schrödingerove jednačine za harmonijski oscilator 107

Iz (4.22) i (4.24) slijedi da, u odnosu na prostorne refleksije, vlastite funkcije imaju slijedeću osobinu simetrije:

$$\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x). \quad (4.34)$$

Ovo znači da je za:

$$\begin{aligned} n \text{ parno : } & \psi(-x) = \psi(x) \rightarrow \text{parnost je } +1 \\ n \text{ neparno : } & \psi(-x) = -\psi(x) \rightarrow \text{parnost je } -1. \end{aligned}$$

Može se pokazati da funkcije $H_n(\xi)$ imaju tačno n različitih realnih nula i $n+1$ ekstremalnih vrijednosti. Pozivajući se na relaciju (4.22), imamo

$$H_{n+1} = -e^{\xi^2} \frac{d}{d\xi} (e^{-\xi^2} H_n). \quad (4.35)$$

Ako funkcija H_n ima $n+1$ realnih ekstremalnih vrijednosti, tada ih ima i funkcija $e^{-\xi^2} H_n$ (pošto $e^{-\xi^2} \rightarrow 0$ za $\xi \rightarrow \infty$). Ekstremalne vrijednosti se pojavljuju na mjestima gdje je izvod po ξ nula, tako da, na osnovu (4.35), zaključujemo da H_{n+1} ima tačno $n+1$ realnih nula. Na osnovu toga zaključujemo da polinomi $H_n(\xi)$, i, kao posljedica, talasne funkcije $\psi_n(\xi)$, imaju n različitih realnih nula. Ovo je specijalni slučaj opštег teorema koji kaže da je glavni kvantni broj vlastite funkcije identičan sa brojem nula.

Na slici 4.1 neke od funkcija ψ_n su predstavljene zajedno sa odgovarajućim vlastitim vrijednostima energije $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$ koje su predstavljene kao horizontalne linije. Iznad svake od tih linija odgovarajuća vlastita funkcija $\psi_n(x)$ je nacrtana na proizvoljnoj skali. Pored toga, slika sadrži funkciju potencijalne energije

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (4.36)$$

tako da možemo izvršiti poređenje sa klasičnim harmonijskim oscilatorom, koji osciluje određenom amplitudom okarakterisanom iščezavajućom (nultom) kinetičkom energijom na mjestu promjene smjera. Kako je $E = T + V$, oblast klasično mogućih oscilacija je ograničena presječnom tačkom parabole $V(x)$ i horizontalne linije ukupne energije E . Ova slika zapravo pokazuje da su ekstremalne vrijednosti funkcije ψ lokalizovane unutar klasične oblasti, dok se njezini repovi prostiru u beskonačnost.

Odstupanje kvantnih od klasičnih rezultata postaje još uočljivije ako razmotrimo vjerovatnoću položaja čestice. Ako je T period oscilovanja čestice, tada prema klasičnoj (engleski **classical**) fizici imamo

$$w_{\text{cl}}(x)dx = \frac{dt}{T/2} = \frac{2\omega}{2\pi} dt = \frac{\omega}{\pi} \frac{dx}{dx/dt}, \quad (4.37)$$

Čestica vrši harmonijske oscilacije:

$$x = a \sin \omega t, \quad \frac{dx}{dt} = a\omega \cos \omega t = \omega a \sqrt{1 - (x/a)^2}, \quad (4.38)$$

tako da je

$$w_{\text{cl}}(x)dx = \frac{1}{\pi a} \frac{1}{\sqrt{1 - (x/a)^2}} dx. \quad (4.39)$$

Amplituda a se dobija iz izraza za energiju: $E = m\omega^2 a^2 / 2 \Rightarrow a = \sqrt{2E/(m\omega^2)}$. Nasuprot tome, kvantno-mehanička (engleski **quantum**) vjerovatnoća položaja čestice u intervalu od x do $x + dx$ je data sa:

$$w_{\text{qu}}(x)dx = |\psi(x)|^2 dx, \quad (4.40)$$

što znači da je npr. za $n = 1$ i uz (4.33):

$$w_{\text{qu}}(x)dx = |\psi_1(x)|^2 dx = 2\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} e^{-\lambda x^2} \lambda x^2 dx. \quad (4.41)$$

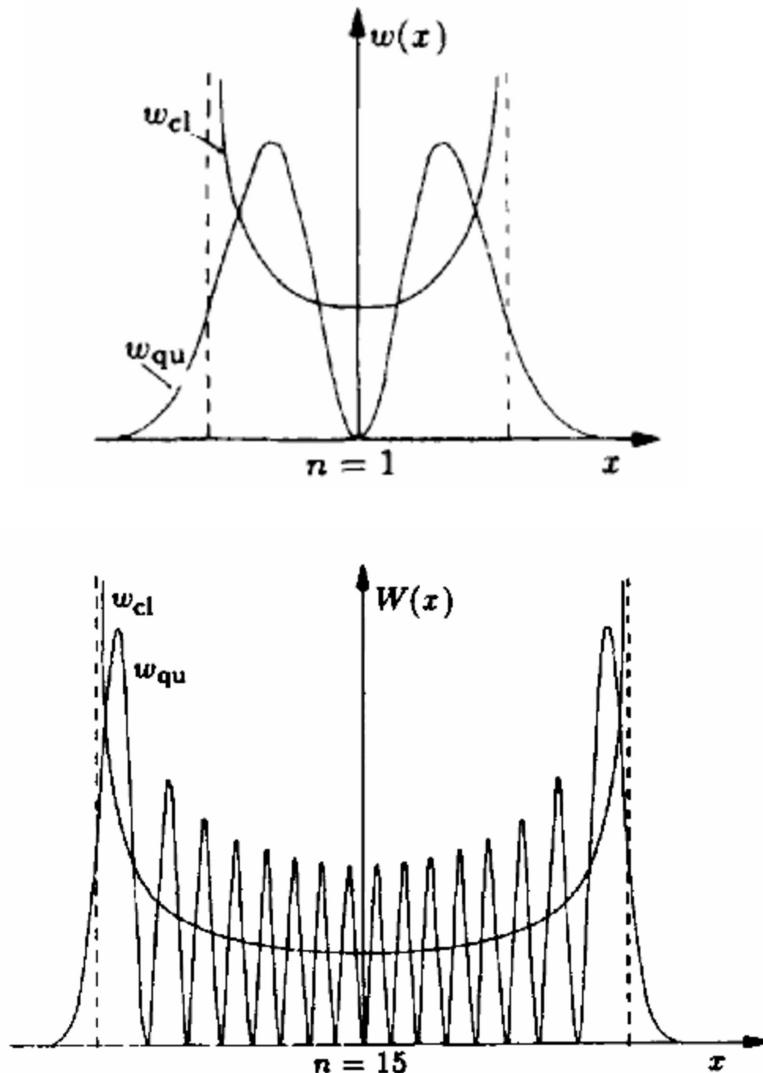
Lako se može pokazati da $w_{\text{qu}}(x)$ ima minimum za $x = 0$ i maksimum za

$$x_{\text{max,qu}} = \frac{\pm 1}{\sqrt{\lambda}} = \pm \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad (4.42)$$

dok, prema klasičnoj fizici, uz $E = E_1 = 3\hbar\omega/2$, vrijedi da je

$$x_{\text{max,cl}} = \pm a = \pm \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} = \pm \sqrt{\frac{3\hbar}{m\omega}}. \quad (4.43)$$

Poređenje w_{cl} i w_{qu} za $n = 1$ je predstavljeno na slici 4.2. Na toj slici je predstavljen i slučaj $n = 15$. Vidimo da slaganje klasične i kvantne teorije postaje bolje sa povećavanjem kvantnog broja n . Za velike kvantne brojeve (ovdje $n = 15$), srednja vrijednost kvantne distribucije aproksimira klasičnu graničnu vrijednost. Sa slike vidimo da izvan oblasti koje su prema klasičnoj mehanici ograničene relacijom $E = T + V$ kvantno-mehanička gustoća vjerovatnoće nije jednaka nuli. Ovo je posljedica činjenice da operatori \hat{T} i \hat{V} ne komutiraju, tj. da odgovarajuće observable ne mogu istovremeno posjedovati tačno određene vrijednosti. Naime, $V(x)$ je funkcija prostora, dok je $\hat{T} = \hat{p}_x^2/(2m)$ funkcija impulsa, pri čemu je $[\hat{p}_x, x]_- = -i\hbar$, tako da, u skladu sa relacijom neodređenosti, nije moguće precizno razdvajiti energiju na T i V ($E = T + V$). Iako se čini da lokalizacija čestice iza klasično dopuštenih granica implicira narušenje zakona očuvanja energije, to nije slučaj. Ako pokušamo da lokalizujemo česticu (tj. koncentrišemo talasnu



Slika 4.2: Poređenje klasične i kvantno-mehaničke gustoće vjerovatnoće položaja čestice koja harmonijski osciluje. Isprekidane linije označavaju klasične tačke okreta. Gornja slika: $n = 1$; donja slika: $n = 15$.

funkciju) u malim “repovima” funkcije ψ , neodređenost impulsa se povećava do tačke gdje nova ukupna energija prelazi vrijednost potencijalne energije $V(x)$. Dakle, sa stanovišta energije, čestica se može naći izvan klasično dozvoljene oblasti za koordinatu x . Talasni karakter kvantno-mehaničke talasne funkcije omogućava prodiranje čestice u klasično zabranjeno područje.

Ponašanje koje smo opisali je odgovorno za *efekat tuneliranja*, prema kojem potencijalna barijera visine V_0 može biti savladana čak i ako čestice

imaju energiju $E < V_0$. Efekat tuneliranja se pojavljuje, na primjer, u slučaju ionizacije atoma ili molekula pomoću jakog polja i kod α raspada. Taj efekat je našao praktičnu primjenu kod tunelirajućeg elektronskog mikroskopa.¹

Dodatna razlika između klasičnog i kvantno-mehaničkog oscilatora je stanje minimalne energije. Klasično čestica može biti u stanju ravnoteže za $x = 0$, $p_x = 0$, $E = 0$. U kvantnoj mehanici najmanja moguća vrijednost energije je data sa $E = E_0 = \hbar\omega/2$ - to je tzv. *nulta energija*. Pokažimo da je postojanje nulte energije direktna posljedica relacije neodređenosti

$$\overline{\Delta x^2} \overline{\Delta p_x^2} \geq \hbar^2/4. \quad (4.44)$$

Analizirajmo izraz

$$\overline{\Delta p_x^2} = \overline{(p_x - \bar{p}_x)^2} = \overline{p_x^2 - 2p_x\bar{p}_x + \bar{p}_x^2} = \overline{p_x^2} - 2\overline{p_x\bar{p}_x} + \overline{\bar{p}_x^2} = \overline{p_x^2} - \bar{p}_x^2. \quad (4.45)$$

Analogno, $\overline{\Delta x^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2$. Sa druge strane, u stanju sa fiksnom energijom, srednje vrijednosti \bar{p}_x i \bar{x} su jednake nuli, pošto je podintegralna funkcija neparna funkcija:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) x \psi_n(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 x dx = 0 \quad (4.46)$$

i

$$\begin{aligned} \bar{p}_x &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \hat{p}_x \psi_n(x) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \frac{d}{dx} \psi_n(x) dx \\ &= -\frac{i\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} |\psi_n(x)|^2 dx = -\frac{i\hbar}{2} |\psi_n(x)|^2 \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Dakle, vrijedi

$$\overline{\Delta p_x^2} = \overline{p_x^2}, \quad \overline{\Delta x^2} = \overline{x^2}, \quad (4.48)$$

tako da se relacija neodređenosti (4.44) može prepisati kao

$$\overline{p_x^2} \overline{x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (4.49)$$

Srednja energija harmonijskog oscilatora je

$$\overline{H} = \frac{\overline{p_x^2}}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \overline{x^2}. \quad (4.50)$$

¹1986. godine Gerd Binnig i Heinrich Rohrer su dobili Nobelovu nagradu za fiziku za otkriće i razvoj tunelirajućeg elektronskog mikroskopa; vidjeti npr.: G. Binnig i H. Rohrer, *Scientific American*, August 1985., str. 40.

Poređenjem relacija (4.49) i (4.50) zaključujemo da povećanje potencijalne energije vodi na smanjenje kinetičke energije i obratno. Na osnovu (4.49) je $\overline{x^2} \geq \hbar^2/(4\overline{p_x^2})$, tako da iz jednačine (4.50) slijedi da je

$$\overline{H} \geq \frac{\overline{p_x^2}}{2m} + \frac{m\omega^2}{8} \frac{\hbar^2}{\overline{p_x^2}}. \quad (4.51)$$

Funkcija $\overline{H} = \overline{H}(\overline{p_x^2})$ ima minimum za $\overline{p_x^2} = m\omega\hbar/2$, što se lako može provjeriti izračunavanjem prvog i drugog izvoda. Kako je stanje sa fiksnom energijom okarakterisano sa $\overline{H} = E$, za minimalnu vrijednost mogućih vlastitih vrijednosti energije dobijamo

$$\min E \geq \frac{1}{2m} \frac{m\omega\hbar}{2} + \frac{m\omega^2}{8} \frac{\hbar^2}{m\omega\hbar/2} = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\hbar\omega}{2} = E_0.$$

Dakle, *nulta energija E_0 je najmanja vrijednost energije koja je kompatibilna sa relacijom neodređenosti.*

Atomi i molekule u čvrstim tijelima vrše male oscilacije. Prema klasičnoj teoriji, oscilacije bi trebale nestajati sa smanjenjem temperature. Ove oscilacije su uzrok disperzije svjetlosti, koja bi, dakle, također trebala iščeznuti sa smanjenjem temperature. Međutim eksperimenti pokazuju da intenzitet raspršene svjetlosti konvergira ka nekoj konačnoj graničnoj vrijednosti, pokazujući da se oscilacije atoma i molekula dešavaju čak i na absolutnoj nuli. To je u skladu sa gore opisanim postojanjem nulte energije. Štaviše, mjerenjem disperzije svjetlosti na kristalima moguće je odrediti tu energiju.

4.3 Opis harmonijskog oscilatora pomoću operatora \hat{a} i \hat{a}^\dagger

Normirane vlastite funkcije harmonijskog oscilatora imaju oblik

$$\psi_n(\xi) = \frac{\sqrt[4]{\lambda}}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n!}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \quad \xi = \sqrt{\lambda}x. \quad (4.52)$$

Za Hermiteove polinome H_n važi slijedeća rekurentne relacije (vidjeti matematički dodatak):

$$\xi H_n = nH_{n-1} + \frac{1}{2} H_{n+1}, \quad \frac{d}{d\xi} H_n = 2nH_{n-1}. \quad (4.53)$$

Iz ovih jednačina se mogu dobiti veze između vlastitih funkcija harmonijskog oscilatora koje pripadaju susjednim kvantnim brojevima:

$$\xi\psi_n = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}, \quad (4.54)$$

$$\frac{\partial}{\partial\xi}\psi_n = 2\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1} - \xi\psi_n. \quad (4.55)$$

Jednačinu (4.55) preuređujemo, koristeći se sa jednačinom (4.54), na takav način da su desne strane tih jednačina međusobno slične:

$$\frac{\partial}{\partial\xi}\psi_n = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}. \quad (4.56)$$

Sabiranjem, odnosno oduzimanjem, jednačina (4.54) i (4.56) dobijamo relacije

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\psi_n &= \sqrt{n}\psi_{n-1}, \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\psi_n &= \sqrt{n+1}\psi_{n+1}. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Koristeći ove jednačine možemo izračunati susjedne vlastite funkcije ψ_{n-1} i ψ_{n+1} iz vlastitih funkcija ψ_n . Definišimo operatore

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right) \equiv \hat{a}, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right) \equiv \hat{a}^\dagger. \quad (4.58)$$

Tada se relacije u (4.57) mogu kraće prepisati kao

$$\hat{a}\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}, \quad \hat{a}^\dagger\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}. \quad (4.59)$$

Za sada ćemo operator \hat{a} zvati *operator snižavanja (spuštanja)* a \hat{a}^\dagger *operator povišavanja (dizanja)*, što je povezano sa tim da ti operatori snižavaju, odnosno povišavaju indeks n stanja ψ_n . U odjeljku 4.6 ćemo dati precizniju interpretaciju i nazine za operatore \hat{a} i \hat{a}^\dagger .

4.4 Osobine operatora \hat{a} i \hat{a}^\dagger

Operatori \hat{a} i \hat{a}^\dagger su međusobno adjungirani (tj. nisu samo-adjungirani ili hermitski), jer vrijedi slijedeća relacija:

$$\int \psi^* \left(\xi\varphi + \frac{\partial\varphi}{\partial\xi} \right) d\xi = \int \left(\xi\psi^* - \frac{\partial\psi^*}{\partial\xi} \right) \varphi d\xi, \quad (4.60)$$

ili, kraće,

$$\langle \psi | \hat{a} \varphi \rangle = \langle \hat{a}^\dagger \psi | \varphi \rangle. \quad (4.61)$$

Ova relacija se može dokazati primjenom parcijalne integracije i koristeći činjenicu da su operatori \hat{a} i \hat{a}^\dagger realni po svojoj definiciji (4.58), tj. $\hat{a} = \hat{a}^*$ i $\hat{a}^\dagger = (\hat{a}^\dagger)^*$.

Talasna funkcija ψ_n je vlastita funkcija proizvoda operatora $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ zato što je

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} \psi_n = \sqrt{n} \hat{a}^\dagger \psi_{n-1} = n \psi_n, \quad (4.62)$$

što se može provjeriti pomoću relacije (4.59). Vlastita vrijednost n je indeks talasne funkcije ψ_n . Zato definišemo *operator broja* \hat{N}

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}, \quad \hat{N} \psi_n = n \psi_n. \quad (4.63)$$

Vlastite vrijednosti operatora \hat{N} su n , a vlastite funkcije su mu ψ_n .

Komutator operatora \hat{a} i \hat{a}^\dagger je jednak jedinici:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]_- = 1. \quad (4.64)$$

To se lako dokazuje izračunavanjem proizvoda $\hat{a} \hat{a}^\dagger$ i $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ koristeći relaciju (4.58).

Uzastopnim djelovanjem operatora \hat{a}^\dagger možemo izračunati sve vlastite funkcije ψ_n , polazeći od osnovnog stanja ψ_0 . Iz (4.59) slijedi da

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^\dagger \psi_{n-1} = \dots = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0. \quad (4.65)$$

Dosadašnji formalizam smo razvili koristeći operatore \hat{a} i \hat{a}^\dagger . Izvedimo sada diferencijalnu jednačinu za osnovno stanje. Za $n = 0$ iz relacija (4.58) i (4.59) nalazimo da je:

$$\hat{a} \psi_0 = 0 \quad \text{tj.} \quad \xi \psi_0 + \frac{\partial \psi_0}{\partial \xi} = 0. \quad (4.66)$$

Smjenom $\psi_0 \propto e^{\alpha \xi^2}$ dobijamo da je $\alpha = -1/2$. Dakle funkcija osnovnog stanja, do na faktor normiranja, je

$$\psi_0 \propto e^{-\xi^2/2},$$

što odgovara rješenju Schrödingerove jednačine harmonijskog oscilatora, koje za osnovno stanje daje (4.33)

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} e^{-\xi^2/2}. \quad (4.67)$$

4.5 Predstavljanje hamiltonijana harmonijskog oscilatora pomoću operatora \hat{a} i \hat{a}^\dagger

Za jednodimenzionalni harmonijski oscilator hamiltonian je dat sa

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2. \quad (4.68)$$

Smjenom $\xi = \sqrt{\lambda}x = \sqrt{m\omega/\hbar}x$ možemo definisati novi operator impulsa

$$\hat{p}_\xi = -i \frac{\partial}{\partial \xi} \Rightarrow \hat{p}_\xi^2 = -\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} = -\frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad (4.69)$$

tako da hamiltonian postaje

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar\omega (\xi^2 + \hat{p}_\xi^2) = \frac{1}{2} \hbar\omega \left(\xi^2 - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right). \quad (4.70)$$

Iz relacije

$$\xi^2 - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} = \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a},$$

koja se lako može provjeriti pomoću (4.58), i korištenjem komutacione relacije (4.64) i definicije (4.63), hamiltonian možemo predstaviti u jednostavnijem obliku kao

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2) = \hbar\omega(\hat{N} + 1/2). \quad (4.71)$$

Iz ovoga možemo izračunati vlastite vrijednosti energije

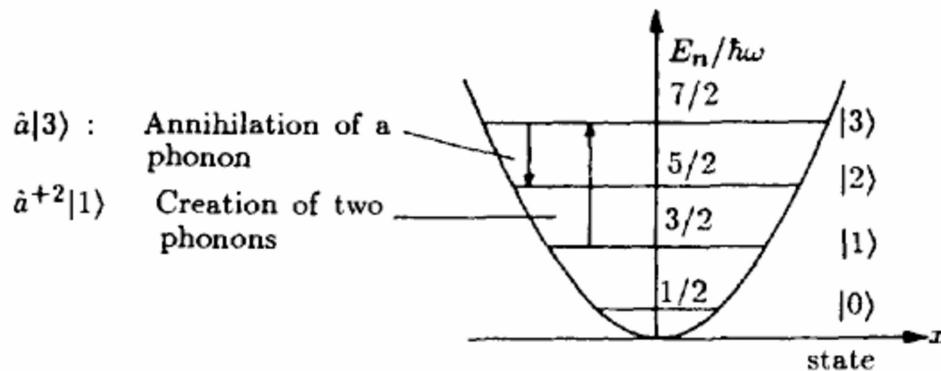
$$\hat{H}\psi_n = \hbar\omega(\hat{N} + 1/2)\psi_n = \hbar\omega(n + 1/2)\psi_n = E_n\psi_n. \quad (4.72)$$

Dakle, vlastite vrijednosti energije su $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.

4.6 Interpretacija operatora \hat{a} i \hat{a}^\dagger

Osnovno stanje ψ_0 ima nultu energiju $E_0 = \hbar\omega/2$. Kako je energetski spektar harmonijskog oscilatora ekvidistantan, energija stanja ψ_n je veća za $n\hbar\omega$ od nulte energije. Energiju $n\hbar\omega$ ćemo raspodijeliti na n energetskih kvanata koji se nazivaju *fononi* (kvanti oscilatornog polja). Stanje ψ_n se naziva *n-fononsko stanje*. U Diracovoј notaciji ono se označava kao

$$\psi_n = |n\rangle. \quad (4.73)$$



Slika 4.3: Energetski nivoi harmonijskog oscilatora i djelovanje operatora stvaranja i poništavanja.

Ket vektori $|n\rangle$ sadrže u oznaci broj fonona n . Nulto fononsko stanje (stanje bez fonona) $|0\rangle$ se zove vakuumsko stanje ili *vakuum*. Koristeći gornju notaciju jednačina (4.59) postaje

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (4.74)$$

Ovo interpretiramo na slijedeći način: kada djeluje na talasnu funkciju operator \hat{a} poništava (anihilira) jedan fonon, dok operator \hat{a}^\dagger stvara (kreira) jedan fonon. Od sada ćemo operator \hat{a} zvati operator *poništavanja (anihilacije)*, a operator \hat{a}^\dagger operator *stvaranja (kreacije)*. \hat{N} se naziva *operator broja fonona*, a njegove vlastite vrijednosti, date jednačinom

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad (4.75)$$

predstavljaju broj fonona odgovarajućeg stanja.

Uvođenje fononske reprezentacije se često (donekle neprecizno) naziva *druga kvantizacija*. Kvanti talasnog polja oscilatora su upravo *fononi*. Ovo postaje jasno ako razmotrimo analogiju sa *fotonima* – kvantima elektromagnetskog polja. Ovi pojmovi se preciznije i detaljnije objašnjavaju u okviru kvantne teorije polja.

4.7 Matematički dodatak: Hipergeometrijske funkcije

4.7.1 Hipergeometrijska diferencijalna jednačina

Hipergeometrijska diferencijalna jednačina koju je uveo Gauss (C. F. Gauss, 1777.-1855.)

$$z(1-z) \frac{d^2\phi}{dz^2} + [c - (a+b+1)z] \frac{d\phi}{dz} - ab\phi = 0 \quad (4.76)$$

sadrži tri slobodna parametra a, b, c i ima više različitih rješenja. Ona ima tri regularne singularne tačke (neesencijalni singulariteti) pri $z = 0, 1, \infty$. Da bismo riješili jednačinu (4.76) predstaviti ćemo je u obliku stepenog reda $\phi(z) = z^\sigma \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu z^\nu$. Dobija se rekurentna relacija

$$\begin{aligned} & z(1-z) z^\sigma \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu (\nu+\sigma)(\nu+\sigma-1) z^{\nu-2} \\ & + [c - (a+b+1)z] z^\sigma \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu (\nu+\sigma) z^{\nu-1} - abz^\sigma \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu z^\nu = 0. \end{aligned} \quad (4.77)$$

Množenjem faktora i sređivanjem članova nalazimo da je

$$\begin{aligned} & c_0\sigma(c+\sigma-1)z^{\sigma-1} + \sum_{\nu=0}^{\infty} \left[c_{\nu+1}(\nu+\sigma+1)(\nu+c+\sigma) \right. \\ & \left. - c_\nu(\nu+a+\sigma)(\nu+b+\sigma) \right] z^{\nu+\sigma} = 0. \end{aligned} \quad (4.78)$$

Da bi ovaj izraz bio identički jednak nuli svi koeficijenti moraju biti jednaki nuli, tj. vrijedi tzv. "indeksna jednačina"

$$\sigma(c-1+\sigma) = 0 \quad (4.79)$$

i

$$c_{\nu+1} = \frac{(\nu+a+\sigma)(\nu+b+\sigma)}{(\nu+1+\sigma)(\nu+c+\sigma)} c_\nu. \quad (4.80)$$

Prema tome, ako stavimo $c_0 = 1$, jedno rješenje jednačine (4.76) je dato sa

$$\phi(z) = z^\sigma \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(a+\sigma)_\nu (b+\sigma)_\nu}{(1+\sigma)_\nu (c+\sigma)_\nu} z^\nu, \quad (4.81)$$

gdje smo uveli tzv. Pochammerove simbole:

$$(a)_\nu = a(a+1)\dots(a+\nu-1), \quad (a)_0 = 1. \quad (4.82)$$

Radius konvergencije je:

$$r = \lim_{\nu \rightarrow \infty} \left| \frac{c_\nu}{c_{\nu+1}} \right| = 1. \quad (4.83)$$

Indeksna jednačina (4.79) daje dvije moguće vrijednosti za eksponent σ :

1) $\sigma = 0$. U tom slučaju rješenje je *hipergeometrijski red*

$$\phi_1(z) = {}_2F_1(a, b; c; z) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(a)_\nu (b)_\nu}{(c)_\nu} \frac{z^\nu}{\nu!}. \quad (4.84)$$

Indeksi od ${}_2F_1$ su povezani sa slijedećom generalizacijom hipergeometrijskog reda

$${}_pF_q(\alpha_1, \dots, \alpha_p; \beta_1, \dots, \beta_q; z) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(\alpha_1)_\nu \cdots (\alpha_p)_\nu}{(\beta_1)_\nu \cdots (\beta_q)_\nu} \frac{z^\nu}{\nu!}. \quad (4.85)$$

Rješenje (4.84) ima smisla samo ako u redu ${}_2F_1$ nijedan od različitih članova u nazivniku nije jednak nuli, tj. postojanje ${}_2F_1$ vodi na uslov $c \neq -n$, gdje je $n = 0, 1, \dots$. Tada je taj red holomorfan na jediničnom krugu. Kada je $a = -n$ ili $b = -n$, red se svodi na polinom n -toga stepena. Npr.

$${}_2F_1(-n, n+1; 1; x) = P_n(1-2x) \quad (4.86)$$

je Legendreov polinom. Slijedeći specijalni slučajevi su Gegenbauerovi polinomi i Čebišovljevi polinomi.

2) $\sigma = 1-c$. Prema (4.81) i (4.84) drugo rješenje jednačine (4.76) se može izraziti pomoću hipergeometrijske funkcije sa izmjenjenim parametrima:

$$\phi_2(z) = z^{1-c} {}_2F_1(a+1-c, b+1-c; 2-c; z). \quad (4.87)$$

Zapazimo faktor z^{1-c} ispred hipergeometrijske funkcije ${}_2F_1$. Rješenje ϕ_2 postoji samo ako je $c \neq 2, 3, \dots$

Prema tome, *opšte rješenje* hipergeometrijske diferencijalne jednačine je

$$\phi(z) = A {}_2F_1(a, b; c; z) + B z^{1-c} {}_2F_1(a+1-c, b+1-c; 2-c; z), \quad (4.88)$$

pod uslovom da c nije pozitivan cijeli broj. U suprotnom slučaju postoji samo jedno rješenje. Drugo nezavisno fundamentalno rješenje tada postaje komplikovanije.

Za analitičko produženje rješenja izvan područja konvergencije koristit ćeemo formulu

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b; c; z) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)}(-z)^{-a} {}_2F_1(a, 1-c+a; 1-b+a; z^{-1}) \\ &\quad + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)}(-z)^{-b} {}_2F_1(b, 1-c+b; 1-a+b; z^{-1}). \end{aligned} \quad (4.89)$$

Na osnovu toga se dobija asimptotsko ponašanje za $|z| \rightarrow \infty$:

$${}_2F_1(a, b; c; z) \rightarrow \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)}(-z)^{-a} + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)}(-z)^{-b}. \quad (4.90)$$

4.7.2 Konfluentna hipergeometrijska diferencijalna jednačina

Analitičkim produženjem jediničnog kruga na cijelu kompleksnu ravan možemo dobiti još jednu važnu diferencijalnu jednačinu. Linearnom transformacijom $x = bz$ jednačina (4.76) se svodi na

$$x \left(1 - \frac{x}{b}\right) \frac{d^2\phi}{dx^2} + \left[c - (a+1) \frac{x}{b} - x\right] \frac{d\phi}{dx} - a\phi = 0. \quad (4.91)$$

U limesu $b \rightarrow \infty$ dobijamo *Kummerovu* (E. E. Kummer, 1810.-1893.) *diferencijalnu jednačinu*:

$$x \frac{d^2\phi}{dx^2} + (c-x) \frac{d\phi}{dx} - a\phi = 0. \quad (4.92)$$

Ova jednačina ima regularnu singularnu tačku $x = 0$ i esencijalno (suštinski) singularnu tačku $x = \infty$ koja se pojavljuje uslijed stapanja (“confluence”) tačaka $z = 1$ i $z = \infty$. Opšte rješenje (4.92) se dobija razvojem u stepeni red oko tačke $x = 0$. Vrijedi

$$\phi(x) = A {}_1F_1(a; c; x) + Bx^{1-c} {}_1F_1(a+1-c; 2-c; x), \quad (4.93)$$

gdje je *konfluentna hipergeometrijska funkcija*

$${}_1F_1(a; c; x) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(a)_\nu}{(c)_\nu} \frac{x^\nu}{\nu!} = 1 + \frac{a}{c} \frac{x}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)} \frac{x^2}{2!} + \dots \quad (4.94)$$

Rješenje (4.94) vodi porijeklo od (4.88) u limesu $b \rightarrow \infty$, uz $x = bz$. Red (19) postoji samo pod uslovom da je $c \neq -n$. On konvergira za proizvoljne

vrijednosti x . Slučaj $a = -n$ ponovo daje konačni polinom. Specijalni slučajevi su Hermiteovi i Laguerreovi polinomi.

Asimptotsko ponašanje za $|x| \rightarrow \infty$ je

$${}_1F_1(a; c; x) \rightarrow \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} e^{-ia\pi} x^{-a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^x x^{a-c}. \quad (4.95)$$

Za $a = -n$ dobija se polinom n -tog stepena. Laguerreov polinom je

$$L_n^{(m)}(z) = \frac{(n+m)!}{n!m!} {}_1F_1(-n; m+1; z), \quad (4.96)$$

a Hermiteov:

$$\begin{aligned} H_{2n}(z) &= (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} {}_1F_1(-n; 1/2; z^2), \\ H_{2n+1}(z) &= (-1)^n \frac{(2n+1)!}{n!} 2z {}_1F_1(-n; 3/2; z^2). \end{aligned} \quad (4.97)$$

Navedimo na kraju jednu korisnu integralnu formulu za hipergeometrijske funkcije:

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty e^{-st} t^{d-1} {}_A F_B [(a), (b); kt] {}_{A'} F_{B'} [(a'), (b'); k't] dt \\ &= s^{-d} \Gamma(d) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(a)_m (d)_m k^2}{(b)_m m! s^m} {}_{A'+1} F_{B'} [(a'), d+m; b'; k'/s], \end{aligned} \quad (4.98)$$

sa slijedećom notacijom: $(a)_m = a(a+1)(a+2)\dots(a+m-1)$ i

$$\begin{aligned} {}_A F_B [(a), (b); z] &= {}_A F_B [a_1, a_2, \dots, a_A; b_1, b_2, \dots, b_B; z] \\ &= 1 + \frac{a_1 a_2 \dots a_A}{b_1 b_2 \dots b_B} \frac{z}{1!} + \frac{a_1 (a_1+1) a_2 (a_2+1) \dots a_A (a_A+1)}{b_1 (b_1+1) b_2 (b_2+1) \dots b_B (b_B+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots \end{aligned} \quad (4.99)$$

4.8 Matematički dodatak: Hermiteovi polinomi

Na osnovu rezultata dobijenih u odjeljcima 4.1 i 4.2 funkcija:

$\exp(-\lambda x^2/2) H_n(\sqrt{\lambda}x)$, tj. Hermiteov polinom pomnožen sa $\exp(-\lambda x^2/2)$, očito zadovoljava diferencijalnu jednačinu (4.6) ako je: $k^2 = (2m/\hbar^2)E_n = (2m/\hbar^2)\hbar\omega(n+1/2) = (2m\omega/\hbar)(n+1/2) = 2\lambda(n+1/2)$. Uvrštavajući

$$\frac{d}{dx} \left[e^{-\lambda x^2/2} H_n(\sqrt{\lambda}x) \right] = -\lambda x e^{-\lambda x^2/2} H_n(\sqrt{\lambda}x) + e^{-\lambda x^2/2} \frac{dH_n(\sqrt{\lambda}x)}{dx},$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \left[e^{-\lambda x^2/2} H_n(\sqrt{\lambda}x) \right] &= (\lambda x)^2 e^{-\lambda x^2/2} H_n(\sqrt{\lambda}x) + e^{-\lambda x^2/2} \frac{d^2 H_n(\sqrt{\lambda}x)}{dx^2} \\ &\quad - \lambda e^{-\lambda x^2/2} H_n(\sqrt{\lambda}x) - 2\lambda x e^{-\lambda x^2/2} \frac{dH_n(\sqrt{\lambda}x)}{dx}, \end{aligned}$$

u (4.6) dobijamo:

$$\begin{aligned} (\lambda^2 x^2 - \lambda) H_n(\sqrt{\lambda}x) - 2\lambda x \frac{dH_n(\sqrt{\lambda}x)}{dx} + \frac{d^2 H_n(\sqrt{\lambda}x)}{dx^2} \\ + \left[2\lambda \left(n + \frac{1}{2} \right) - \lambda^2 x^2 \right] H_n(\sqrt{\lambda}x) = 0, \end{aligned}$$

tj.

$$\frac{d^2 H_n(\sqrt{\lambda}x)}{dx^2} - 2\lambda x \frac{dH_n(\sqrt{\lambda}x)}{dx} + 2\lambda n H_n(\sqrt{\lambda}x) = 0. \quad (4.100)$$

Uvodeći varijablu $\xi = \sqrt{\lambda}x$, nakon dijeljenja sa λ dobijamo

$$\frac{d^2 H_n(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n(\xi)}{d\xi} + 2n H_n(\xi) = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.101)$$

Ako je n pozitivan cijeli broj ova jednačina predstavlja *definicionu diferencijalnu jednačinu* za Hermiteove polinome. Koristeći (4.101) možemo teoriju Hermiteovih polinoma formulisati na elegantniji način uvodeći generirajuću funkciju ili *generatrisu* $S(\xi, s)$

$$S(\xi, s) = e^{\xi^2 - (s-\xi)^2} = e^{-s^2 + 2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n. \quad (4.102)$$

Razvijajući eksponencijalnu funkciju po stepenima s i ξ lako možemo pokazati da su koeficijenti uz stepene s^n Hermiteovi polinomi po ξ . Vrijedi:

$$\frac{\partial S}{\partial \xi} = 2se^{-s^2+2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2s^{n+1}}{n!} H_n(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi}, \quad (4.103)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial s} &= (-2s + 2\xi)e^{-s^2+2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2s + 2\xi)s^n}{n!} H_n(\xi) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^{n-1}}{(n-1)!} H_n(\xi). \end{aligned} \quad (4.104)$$

Izjednačavajući iste stepene s u sumama u gornje dvije jednačine dobijamo

$$\frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} = 2nH_{n-1}(\xi), \quad H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi). \quad (4.105)$$

Odatle slijedi da je

$$\frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} = 2\xi H_n(\xi) - H_{n+1}(\xi), \quad (4.106)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 H_n(\xi)}{\partial \xi^2} &= 2H_n(\xi) + 2\xi \frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} - \frac{\partial H_{n+1}(\xi)}{\partial \xi} \\ &= 2\xi \frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} + 2H_n(\xi) - (2n+2)H_n(\xi) = 2\xi \frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} - 2nH_n(\xi). \end{aligned} \quad (4.107)$$

To je upravo diferencijalna jednačina (4.101), čime smo pokazali da su funkcije $H_n(\xi)$ koje se pojavljuju u generatrisi (4.102) zaista Hermiteovi polinomi.

Rekurentne formule (4.105) se mogu koristiti da se izračunaju polinomi H_n i njihovi izvodi. Pomoću generatrise se može izvesti još jedan eksplisitni izraz za Hermiteove polinome. Na osnovu (4.102) je

$$\frac{\partial^n S(\xi, s)}{\partial s^n} |_{s=0} = H_n(\xi). \quad (4.108)$$

Za proizvoljnu funkciju $f(s - \xi)$ je $\partial f / \partial s = -\partial f / \partial \xi$, tako da je

$$\frac{\partial^n S}{\partial s^n} = e^{\xi^2} \frac{\partial^n e^{-(s-\xi)^2}}{\partial s^n} = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-(s-\xi)^2}. \quad (4.109)$$

Poređenjem (4.109) sa (4.108) dobijamo vrlo korisnu formulu:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2}. \quad (4.110)$$

4.9 Zadaci sa pismenih ispita iz kvantne mehanike

Zadatak 4.1. Naći vlastite funkcije i vlastite energije čestice nanelektrisanja e i mase m koja se kreće pod uticajem trodimenzionalnog izotropnog harmonijskog potencijala u električnom polju jačine E_0 usmjerenom duž x -ose [potencijal $V(\mathbf{r}) = \frac{m}{2}\omega^2 r^2 - eE_0 x$]. [Uputa: Koristiti metod separacije varijabli i rješenja za vlastite funkcije i vlastite energije jednodimenzionalnog harmonijskog oscilatora: $\psi_n(\xi) = N_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$, $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$, $\xi = x\sqrt{\lambda}$, $\lambda = m\omega/\hbar$.]

Poglavlje 5

Prelaz sa klasične na kvantnu mehaniku

5.1 Jednačina kretanja za srednje vrijednosti

Razmotrimo hermitski operator \hat{L} . Srednja vrijednost operatora je, kao što znamo, definisana kao

$$\overline{L} = \int \psi^* \hat{L} \psi dV. \quad (5.1)$$

Pošto i operator \hat{L} i talasna funkcija ψ mogu biti vremenski zavisni, srednja vrijednost \overline{L} će u opštem slučaju zavisi od vremena. Pri izračunavanju izvoda po vremenu od \overline{L} u relaciji (5.1) možemo zamijeniti redoslijed differenciranja po vremenu i integriranja po prostornim koordinatama. To daje:

$$\frac{d}{dt} \overline{L} = \int \psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \psi dV + \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{L} \psi + \psi^* \hat{L} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dV. \quad (5.2)$$

Prvi integral na desnoj strani u (5.2) predstavlja srednju vrijednost parcijalnog izvoda po vremenu operatora \hat{L} . Drugi integral se može pojednostaviti uz pomoć vremenski zavisne Schrödingerove jednačine:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \hat{H}^* \psi^*. \quad (5.3)$$

Ako iskoristimo hermitičnost hamiltonijana \hat{H} dobijamo

$$\frac{d}{dt} \overline{L} = \int \psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \psi dV + \frac{i}{\hbar} \int \psi^* [\hat{H}, \hat{L}]_- \psi dV, \quad (5.4)$$

ili, jednostavnije,

$$\frac{d}{dt} \overline{L} = \overline{\frac{\partial \hat{L}}{\partial t}} + \frac{i}{\hbar} \overline{[\hat{H}, \hat{L}]_-}. \quad (5.5)$$

Uzimajući (5.5) kao osnovu, možemo definisati totalni vremenski izvod operatora $d\hat{L}/dt$:

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}]_{-}. \quad (5.6)$$

Iz ove definicije i relacije (5.5) vidimo da je vremenski izvod srednje vrijednosti operatora \hat{L} jednak srednjoj vrijednosti $d\hat{L}/dt$.

Za sumu i proizvod proizvoljnih linearnih operatora \hat{A} i \hat{B} vrijede slijedeća pravila:

$$\frac{d}{dt}(\hat{A} + \hat{B}) = \frac{d\hat{A}}{dt} + \frac{d\hat{B}}{dt}, \quad (5.7)$$

$$\frac{d}{dt}(\hat{A}\hat{B}) = \frac{d\hat{A}}{dt}\hat{B} + \hat{A}\frac{d\hat{B}}{dt} \quad (5.8)$$

što možemo dokazati primjenom (5.6). Dokažimo relaciju (5.8). Vrijedi:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\hat{A}\hat{B}) &= \frac{\partial}{\partial t}(\hat{A}\hat{B}) + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}\hat{B}]_{-} \\ &= \frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\hat{B} + \hat{A}\frac{\partial\hat{B}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\hat{H}\hat{B} + \hat{A}\hat{H}\hat{B} - \hat{A}\hat{B}\hat{H}) \\ &= \frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\hat{B} + \hat{A}\frac{\partial\hat{B}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}([\hat{H}, \hat{A}]_{-}\hat{B} + \hat{A}[\hat{H}, \hat{B}]_{-}) \\ &= \frac{d\hat{A}}{dt}\hat{B} + \hat{A}\frac{d\hat{B}}{dt}. \end{aligned}$$

5.2 Ehrenfestov teorem

Razmotrimo vremenske izvode operatora koordinate i impulsa. Pošto nijedan od tih operatora ne zavisi eksplicitno od vremena to za njihove x komponente vrijedi:

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{x}]_{-}, \quad (5.9)$$

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{p}_x]_{-}. \quad (5.10)$$

Za ostale komponente vrijede analogni izrazi. Da bismo izračunali komutatore posmatrajmo hamiltonijan čestice koja se nalazi u potencijalnom polju:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \hat{V}(x, y, z). \quad (5.11)$$

Operator \hat{x} komutira sa \hat{p}_z^2 i \hat{p}_y^2 i sa potencijalom za koji smo pretpostavili da zavisi isključivo od prostornih koordinata. Dakle, vrijedi:

$$[\hat{H}, x]_- = \frac{1}{2m} [\hat{p}_x^2, x]_- = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x [\hat{p}_x, x] + [\hat{p}_x, x] \hat{p}_x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\hat{p}_x}{m}, \quad (5.12)$$

Komutator sa komponentom impulsa \hat{p}_x daje

$$[\hat{H}, \hat{p}_x]_- = [\hat{V}(x, y, z), \hat{p}_x]_- = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{V}}{\partial x}. \quad (5.13)$$

Dakle, iz (5.9) i (5.10) dobijamo

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}_x}{m}, \quad (5.14)$$

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = -\frac{\partial \hat{V}}{\partial x}. \quad (5.15)$$

Prema tome, za operatore položaja i impulsa vrijede iste relacije kao i za koordinate položaja i impulsa u klasičnoj mehanici:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p_x}{m} = v_x, \quad \frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} = F_x. \quad (5.16)$$

Nalazeći srednju vrijednost relacija (5.14) i (5.15) i uzimajući pri tome u obzir da je $\overline{dx/dt} = d\bar{x}/dt$, dobijamo:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int \psi^* \hat{x} \psi dx &= \frac{1}{m} \int \psi^* \hat{p}_x \psi dx, \\ \frac{d}{dt} \int \psi^* \hat{p}_x \psi dx &= - \int \psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \psi dx. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Obje ove relacije su obuhvaćene *Ehrenfestovim teoremom* (1927) koji glasi: srednje vrijednosti kvantno-mehaničkih veličina se mijenjaju u toku vremena u skladu sa klasičnim jednačinama.

5.3 Konstante kretanja i zakoni očuvanja

Vremenski nezavisan operator je konstanta kretanja ako taj operator komutira sa hamiltonijanom. Zaista, u slučaju vremenske nezavisnosti imamo

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}]_- = 0. \quad (5.18)$$

Ako sam operator ne zavisi eksplisitno od vremena, tj. ako je $\partial\hat{L}/\partial t = 0$, slijedi da je $[\hat{H}, \hat{L}] = 0$. Dakle, samo oni operatori \hat{L} koji: (1) nisu eksplisitno vremenski zavisni i (2) komutiraju sa hamiltonijanom, predstavljaju konstante kretanja. Ova činjenica će biti vrlo bitna u našem daljem proučavanju kvantne mehanike.

Operator \hat{H} ukupne energije očito komutira sam sa sobom. Prema tome, on je konstanta kretanja u slučaju kada nije eksplisitno vremenski zavisan. Ovo je upravo *zakon održanja (očuvanja) energije*.

Impuls \hat{p}_x ne zavisi eksplisitno od vremena. Na osnovu relacije (5.13), odmah slijedi da je impuls konstantan ako je $\partial V/\partial x = 0$. Dakle, *zakon održanja impulsa* vrijedi također i u kvantnoj mehanici.

Za centralne sile, potencijal $V(\mathbf{r}) = V(r)$ je funkcija samo radijusa r . Kvadrat operatora momenta impulsa $\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta,\phi}^2$ komutira sa $V(r)$. Kompletan hamiltonijan je

$$\hat{H} = \hat{T}_r + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + \hat{V}(r), \quad (5.19)$$

tako da je

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0. \quad (5.20)$$

Dakle, vrijedi *zakon održanja momenta impulsa*. Analogno vrijedi i za z komponentu operatora momenta impulsa, jer je $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0$ i $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$.

5.4 Analogija klasičnih Poissonovih zagrada i kvantno-mehaničkih komutatora

Kvantno-mehanička jednačina (5.6), koja daje totalni izvod operatora \hat{F} po vremenu

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{H}]_-, \quad (5.21)$$

ima formalni analogon u klasičnoj mehanici – *Poissonove zgrade*. Totalni izvod po vremenu funkcije $F(p_i, q_i, t)$ dat je sa

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \right). \quad (5.22)$$

Ovdje su p_i i q_i generalisani impulsi i koordinate, a f je broj stepeni slobode. Koristeći Hamiltonove jednačine iz klasične mehanike, drugi član na desnoj strani jednačine (5.22) se transformiše u

$$\sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \equiv \{F, H\}, \quad (5.23)$$

tako da je

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\}. \quad (5.24)$$

Analogija između klasične jednačine (5.24) i kvantno-mehaničke jednačine (5.21) je očita. Ovako definisani član $\{F, H\}$, koji uključuje Hamiltonovu funkciju H , naziva se Poissonova zagrada. Prelaz sa klasične mehanike na kvantnu mehaniku se očito može ostvariti prelazom sa klasičnih fizikalnih veličina na odgovarajuće kvantno-mehaničke operatore uz zamjenu Poissonove zgrade $\{, \}$ sa komutatorom $\frac{1}{i\hbar}[\cdot, \cdot]_-$. Operator $\frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{H}]_-$ se također naziva i *kvantno-mehanička Poissonova zagrada*.

Ova razmatranja analogije klasične i kvantne mehanike se mogu nastaviti. U klasičnoj mehanici baratamo kanonskim varijablama i kažemo da je transformacija sa q_i, p_i na Q_i, P_i kanonska ako i nove varijable Q_i i P_i zadovoljavaju Hamiltonove jednačine. Ovo znači prelaz

$$H(p_i, q_i) \rightarrow \mathcal{H}(P_i, Q_i), \quad (5.25)$$

gdje \mathcal{H} predstavlja novu Hamiltonovu funkciju koja zavisi od koordinata P_i i Q_i . Ista tvrdnja se može iskazati Poissonovom zgradom. I zaista, vrijedi relacija

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}, \quad (5.26)$$

zato što je ista ekvivalentna sa

$$\sum_{\sigma=1}^f \left(\frac{\partial q_i}{\partial q_\sigma} \frac{\partial p_j}{\partial p_\sigma} - \frac{\partial q_i}{\partial p_\sigma} \frac{\partial p_j}{\partial q_\sigma} \right) = \delta_{ij}. \quad (5.27)$$

Član $(\partial q_i / \partial p_\sigma)(\partial p_j / \partial q_\sigma)$ uvijek iščezava, dok $(\partial q_i / \partial q_\sigma)(\partial p_j / \partial p_\sigma)$ daje jedinicu samo za $i = j$, odakle se dobija δ_{ij} . Ako izvršimo prelaz na koordinate Q_i i P_i tada je transformacija kanonska samo ako vrijedi

$$\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij}. \quad (5.28)$$

Dalje, također važe slijedeće jednačine:

$$\{Q_i, Q_j\} = 0 \quad \text{i} \quad \{P_i, P_j\} = 0. \quad (5.29)$$

Prelazeći na kvantnu mehaniku, dobijamo analogne relacije. Pri tome uvrštavamo $\hat{p}_j = -i\hbar\partial/\partial x_j$ u gore navedenu kvantno-mehaničku Poissonovu zgradu:

$$-\frac{i\hbar}{i\hbar} \left[x_i, \frac{\partial}{\partial x_j} \right]_- = \delta_{ij}. \quad (5.30)$$

Prema tome, impuls je zamijenjen operatorom. Analogno, obadvije relacije u (5.29) vrijede i u kvantnoj mehanici:

$$[x_i, x_j]_- = 0 \quad \text{i} \quad \left[\frac{\partial}{\partial x_i}, \frac{\partial}{\partial x_j} \right]_- = 0. \quad (5.31)$$

Za klasične Poissonove zagrade vrijede relacije:

$$\begin{aligned} \{A, B\} &= -\{B, A\}, \\ \{A, C\} &= 0 \quad \text{za } C = \text{const}, \\ \{A_1 A_2, B\} &= \{A_1, B\} A_2 + A_1 \{A_2, B\}, \\ \{A_1 + A_2, B\} &= \{A_1, B\} + \{A_2, B\}, \\ \{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} &= 0, \end{aligned} \quad (5.32)$$

pri čemu se zadnja relacija naziva Jacobijev identitet. Ako se uzmu u obzir ove relacije, lako se može provjeriti da za kvantno-mehaničke komutatore vrijede iste algebarske relacije. To je prvi zapazio P. A. M. Dirac koji je koristio te relacije da pokaže formalnu analogiju između kvantne i Hamiltonove mehanike.

Prelaz sa klasične na kvantnu mehaniku se može formalno ostvariti pomoću specijalnih kanonskih transformacija sa komutatorima:

$$[\hat{p}_i, x_j]_- = i\hbar\delta_{ij}, \quad [x_i, x_j]_- = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j]_- = 0. \quad (5.33)$$

Da bismo dobili Hamiltonov operator (hamiltonijan) koristeći Hamiltonovu funkciju, *uvijek se prvo mora transformisati funkcija u Descartesove koordinate* prije nego što se uvedu operatori. To je najsigurniji put prelaska sa klasičnih na odgovarajuće kvantno-mehaničke sisteme.

Poglavlje 6

Sferno simetrični potencijal. Vodonikov atom

6.1 Schrödingerova jednačina sa Coulombovim potencijalom

Najvažniji primjer kretanja čestice u potencijalnom polju je vodonikov atom. Elektron i proton se privlače silom V_0/r^2 , koja odgovara potencijalu $-V_0/r$. Ovdje smo uveli skraćenu oznaku $V_0 = e^2/(4\pi\varepsilon_0)$, a r je koordinata relativnog kretanja. Izabrat ćemo da je proton u centru našeg koordinatnog sistema i uvest ćemo redukovani masu elektrona:

$$m = \frac{m_e}{1 + m_e/m_p} \approx m_e \left(1 - \frac{1}{1836}\right). \quad (6.1)$$

Pošto je naš potencijal centralan, koristit ćemo sferne koordinate. Stacionarna Schrödingerova jednačina je

$$\hat{H}\psi = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{V_0}{r}\right)\psi = E\psi. \quad (6.2)$$

Kvadrat operatora impulsa

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2\Delta = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\Delta_{\vartheta,\varphi}\right)$$

se može, uz pomoć relacije $\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2\Delta_{\vartheta,\varphi}$, separirati na radijalni dio i ugaoni dio koji sadrži operator ugaonog momenta. Pri tome Schrödingerova jednačina poprima oblik

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2}\right)\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{V_0}{r}\right)\psi = 0, \quad (6.3)$$

gdje je centrifugalni član $-\hat{\mathbf{L}}^2/(\hbar^2 r^2)$ analogan članu koji se javlja u Keplerovom problemu iz klasične mehanike.

6.2 Separacija varijabli u sfernim koordinatama

Separacijom varijabli

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{R(r)}{r} Y(\vartheta, \varphi) \quad (6.4)$$

moguće je razdvojiti jednačinu (6.3) na radijalni i ugaoni dio. Poći ćemo od relacije

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{R(r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} \quad (6.5)$$

i uvesti konstantu separacije $l(l+1)\hbar^2$. Dobijamo

$$\frac{r^2}{R(r)} \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + r^2 \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{V_0}{r} \right) = \frac{1}{\hbar^2 Y(\vartheta, \varphi)} \hat{\mathbf{L}}^2 Y(\vartheta, \varphi) = l(l+1). \quad (6.6)$$

Prema tome, imamo dvije jednačine:

$$\frac{\partial^2 R_l(r)}{\partial r^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{V_0}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l(r) = 0, \quad (6.7)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad l = 0, 1, \dots, \quad -l \leq m \leq l. \quad (6.8)$$

Rješenja ugaone diferencijalne jednačine su nam već poznati sferni harmonici $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. Konstanta separacije odgovara kvadratu ugaonog momenta $\hat{\mathbf{L}}^2 \leftrightarrow \hbar^2 l(l+1)$, a dodatni kvantni broj m karakteriše z komponentu ugaonog momenta $\hat{L}_z \leftrightarrow m\hbar$. Radijalna funkcija $R_l(r)$ zavisi od kvantnog broja orbitalnog ugaonog momenta l . Uskoro ćemo vidjeti da uslov za kvadratičnu integrabilnost i normiranje talasne funkcije vodi na još jedan kvantni broj – tzv. radijalni kvantni broj n_r .

6.3 Rješavanje radijalne Schrödingerove jednačine za vodonikov atom

Da bismo našli spektar energija dovoljno je analizirati radijalnu Schrödingerovu jednačinu (6.7) zato što se samo u njoj pojavljuje energija E . Naime, problem je sferno simetričan i energija zavisi samo od radijalnog dijela $R(r)$

talasne funkcije. Mi ćemo se ograničiti samo na diskretna vezana stanja koja se karakterišu negativnim vrijednostima energije (rješenja sa pozitivnim energijama odgovaraju kontinuumu i obično se analiziraju u okviru teorije rasjanja). Zbog ortonormiranosti sfernih harmonika uslov normiranja $\int |\psi|^2 dV = 1$ vodi na uslov

$$\int_0^\infty R_l(r) R_l^*(r) dr = 1. \quad (6.9)$$

Da bismo našli odgovarajuću smjenu za rješavanje diferencijalne jednačine (6.7) pogodno je prvo razmotriti limese $r \rightarrow 0$ i $r \rightarrow \infty$. Za $r \rightarrow 0$ član koji sadrži ugaoni moment je dominantan, tako da dobijamo jednačinu

$$\frac{d^2 R_l}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} R_l = 0. \quad (6.10)$$

Potražimo rješenje ove jednačine u obliku stepenog reda $R_l = r^\alpha (1 + a_1 r + a_2 r^2 + \dots)$. Kao rezultat za članove najnižeg reda po r dobijamo jednačinu:

$$\alpha(\alpha - 1)r^{\alpha-2} - l(l+1)r^{\alpha-2} = 0. \quad (6.11)$$

Rješenja ove jednačine su $\alpha = l+1$ i $\alpha = -l$. Pokazuje se da je dovoljno razmotriti slučaj $\alpha = l+1$ (analiza slučaja $\alpha = -l$ vodila bi na ista rješenja).

U drugom asimptotskom limesu $r \rightarrow \infty$ jednačinu (6.7) možemo aproksimirati sa

$$\frac{d^2 R_l}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E R_l = 0. \quad (6.12)$$

Pošto tražimo vezana stanja sa negativnim energijama logično je uvesti skraćenu oznaku

$$\gamma^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} E. \quad (6.13)$$

U tom slučaju, rješenje jednačine (6.12) je

$$U_l = A e^{-\gamma r} + B e^{\gamma r}, \quad (6.14)$$

pri čemu moramo isključiti član uz konstantu B jer on postaje beskonačan za $r \rightarrow \infty$. Da bismo uključili obadva gore analizirana asimptotska slučaja, uvest ćemo smjenu

$$R_l(r) = r^{l+1} e^{-\gamma r} F(r). \quad (6.15)$$

Uvrštavanjem u (6.7), uz oznake

$$z = 2\gamma r, \quad k = \frac{mV_0}{\gamma \hbar^2}, \quad (6.16)$$

dobijamo

$$z \frac{d^2 F}{dz^2} + (2l+2-z) \frac{dF}{dz} - (l+1-k)F = 0. \quad (6.17)$$

Ako se prisjetimo matematičkog dodatka o Kummerovoj diferencijalnoj jednacini, možemo pisati da je

$$F(r) = A {}_1F_1(l + 1 - k; 2l + 2; 2\gamma r), \quad (6.18)$$

gdje smo zanemarili drugi član ukupnog rješenja (4.93) jer se on ponaša kao r^{-2l-1} za $r \rightarrow 0$, tj. $R_l/r \sim r^{-l-1}$ je uvijek divergentno. Da bi ovaj konfluentni red bilo moguće normirati on treba da završava na određenom članu. To vodi na zahtjev za kvantiziranje energije. Zahtjevamo da je

$$l + 1 - k = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.19)$$

odakle je

$$k = n_r + l + 1 = n. \quad (6.20)$$

Broj n je *glavni kvantni broj* ($n = 1, 2, \dots$) i određen je radijalnim kvantnim brojem n_r ($n_r = 0, 1, 2, \dots$) i orbitalnim kvantnim brojem l ($l = 0, 1, 2, \dots$).

Definicije (6.13) i (6.16) nam onda omogućavaju da odredimo energiju veze. Dobijamo da je

$$E_n = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \equiv -\frac{1}{2} \frac{V_0}{a_0 n^2}, \quad (6.21)$$

gdje se veličina

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar^2}{mV_0} = 0,529 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (6.22)$$

naziva Bohrov radijus. Za $n = 1$ dobijamo energiju veze vodonikovog atoma u osnovnom stanju

$$E_0 = -\frac{1}{2} \frac{V_0}{a_0} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = -1 \text{ Ry} = -13,6 \text{ eV}. \quad (6.23)$$

Talasne funkcije vodonikovog atoma su

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = N_{nl} r^l e^{-\gamma_n r} {}_1F_1(-n_r; 2l + 2; 2\gamma_n r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (6.24)$$

gdje je $\gamma_n = mV_0/(\hbar^2 n) = 1/(na_0)$, a konstanta normiranja je

$$N_{nl} = \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!}} (2\gamma_n)^{l+3/2}, \quad n = n_r + l + 1. \quad (6.25)$$

Radijalni dio talasne funkcije R_{nl} očito zavisi od kvantnih brojeva n i l (ili n_r i l). Zavisnost od l potiče od separacije varijabli (6.4) kojom je rotacioni

član $l(l+1)/r^2$ uveden u diferencijalnu jednačinu (6.7), dok je zavisnost od n uzrokovana jednačinom za vlastite vrijednosti energije, odnosno zahtjevom da je talasna funkcija kvadratično integrabilna [uslov normiranja (6.9)].

Funkcije ψ_{nlm} su vlastite funkcije Schrödingerove jednačine (6.3) koje odgovaraju vlastitim vrijednostima energije E_n . Na osnovu jednačina (6.19) i (6.20) slijedi da kvantni brojevi l i m poprimaju vrijednosti $0 \leq l \leq n-1$ i $-l \leq m \leq l$. Brojeći sva moguća stanja sa istom energijom, vidimo da je svaka vlastita vrijednost energije degenerisana n^2 puta:

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l m = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (6.26)$$

U tabelama 6.1 i 6.2 su predstavljene normirane talasne funkcije koje su rješenja Schrödingerove jednačine za vodonikov atom. U tabeli 6.2 talasne funkcije su razdvojene na radijalne dijelove $R_{nl}(r)/r$ i ugaone dijelove $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. U posljednjoj koloni su prikazane energije E_n , koje zavise samo od kvantnog broja n , u jedinicama energije osnovnog stanja $-V_0/(2a_0) = -13,6$ eV.

n	l	m	$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)$		E_n
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \times r^{3/2}$	$\times e^{-\gamma r}$	1
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \times r^{3/2}$	$\times (1 - \gamma r) \times e^{-\gamma r}$	$\frac{1}{4}$
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \times r^{5/2}$	$\times r \times e^{-\gamma r}$	$\frac{1}{4}$
2	1	± 1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \times r^{5/2}$	$\times r \times e^{-\gamma r} \times \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$	$\frac{1}{4}$
3	0	0	$\frac{1}{3\sqrt{\pi}} \times r^{3/2}$	$\times (3 - 6\gamma r + 2\gamma^2 r^2) \times e^{-\gamma r}$	$\frac{1}{9}$
3	1	0	$\frac{2}{\sqrt{3\pi}} \times r^{5/2}$	$\times (2 - \gamma r)r \times e^{-\gamma r}$	$\frac{1}{9}$
3	1	± 1	$\frac{1}{\sqrt{3\pi}} \times r^{5/2}$	$\times (2 - \gamma r)r \times e^{-\gamma r} \times \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$	$\frac{1}{9}$
3	2	0	$\frac{1}{3\sqrt{2\pi}} \times r^{7/2}$	$\times r^2 \times e^{-\gamma r} \times (3 \cos^2 \vartheta - 1)$	$\frac{1}{9}$
3	2	± 1	$\frac{1}{\sqrt{3\pi}} \times r^{7/2}$	$\times r^2 \times e^{-\gamma r} \times \sin \vartheta \cos \vartheta e^{\pm i\varphi}$	$\frac{1}{9}$
3	2	± 2	$\frac{1}{2\sqrt{3\pi}} \times r^{7/2}$	$\times r^2 \times e^{-\gamma r} \times \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$	$\frac{1}{9}$

Tablica 6.1: Normirane talasne funkcije najnižih stanja vodonikovog atoma. Ovdje je $\gamma_n = 1/(na_0)$, $a_0 = \hbar^2/(mV_0)$.

Svako stanje sa vlastitom funkcijom ψ_{nlm} , karakterisanom sa tri kvantna broja n , l i m , je vlastito stanje tri istovremeno mjerljive veličine:

- energije $E_n = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$,
- kvadrata orbitalnog ugaonog momenta $\hat{\mathbf{L}}^2$ i

n	l	m	$R_{nl}(r)$	$Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$	E_n
1	0	0	$\times r^{3/2}$	$\times e^{-\gamma r} \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	1
2	0	0	$\times r^{3/2}$	$\times e^{-\gamma_2 r} \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$\frac{1}{4}$
2	1	0	$\frac{2}{\sqrt{3}} \times r^{5/2}$	$\times r e^{-\gamma_2 r} \times \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$	$\frac{1}{4}$
2	1	± 1	$\frac{2}{\sqrt{3}} \times r^{5/2}$	$\times r e^{-\gamma_2 r} \times \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta \times e^{\pm i\varphi}$	$\frac{1}{4}$
3	0	0	$\frac{8}{3} \times r^{3/2}$	$\times (3 - 6\gamma r + 2\gamma^2 r^2) e^{-\gamma_3 r} \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$\frac{1}{9}$
3	1	0	$\frac{\sqrt{8}}{3} \times r^{5/2}$	$\times (2 - \gamma r) e^{-\gamma_3 r} \times \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$	$\frac{1}{9}$
3	1	± 1	$\frac{\sqrt{8}}{3} \times r^{5/2}$	$\times (2 - \gamma r) e^{-\gamma_3 r} \times \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta \times e^{\pm i\varphi}$	$\frac{1}{9}$
3	2	0	$\sqrt{\frac{8}{45}} \times r^{7/2}$	$\times r^2 e^{-\gamma_3 r} \times \sqrt{\frac{5}{4\pi}} (\frac{3}{2} \cos^2 \vartheta - \frac{1}{2})$	$\frac{1}{9}$
3	2	± 2	$\sqrt{\frac{8}{45}} \times r^{7/2}$	$\times r^2 e^{-\gamma_3 r} \times \sqrt{\frac{5}{24\pi}} 3 \sin \vartheta \cos \vartheta \times e^{\pm i\varphi}$	$\frac{1}{9}$
3	2	± 1	$\sqrt{\frac{8}{45}} \times r^{7/2}$	$\times r^2 e^{-\gamma_3 r} \times \sqrt{\frac{5}{96\pi}} 3 \sin^2 \vartheta \times e^{\pm 2i\varphi}$	$\frac{1}{9}$

Tablica 6.2: Talasne funkcije iz tabele 6.1 sa razdvojenim radijalnim i ugaonim dijelovima.

- projekcije orbitalnog ugaonog momenta na z osu \hat{L}_z .

Glavni kvantni broj n karakteriše energetske nivoe E_n , *azimutalni kvantni broj* l označava veličinu ugaonog momenta $\hat{\mathbf{L}}^2$, a *magnetni kvantni broj* m daje veličinu z komponente ugaonog momenta \hat{L}_z . Prema tome, vlastite vrijednosti tri veličine E_n , $\hat{\mathbf{L}}^2$ i \hat{L}_z su dovoljne da se odredi talasna funkcija $\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)$.

Vjerovatnost da se elektron, opisan talasnom funkcijom $\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)$, nađe u elementu zapremine $dV = r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ je

$$w_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) dV = |\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)|^2 dV. \quad (6.27)$$

Ako uvrstimo

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{R_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (6.28)$$

možemo tu vjerovatnoću prepisati na slijedeći način

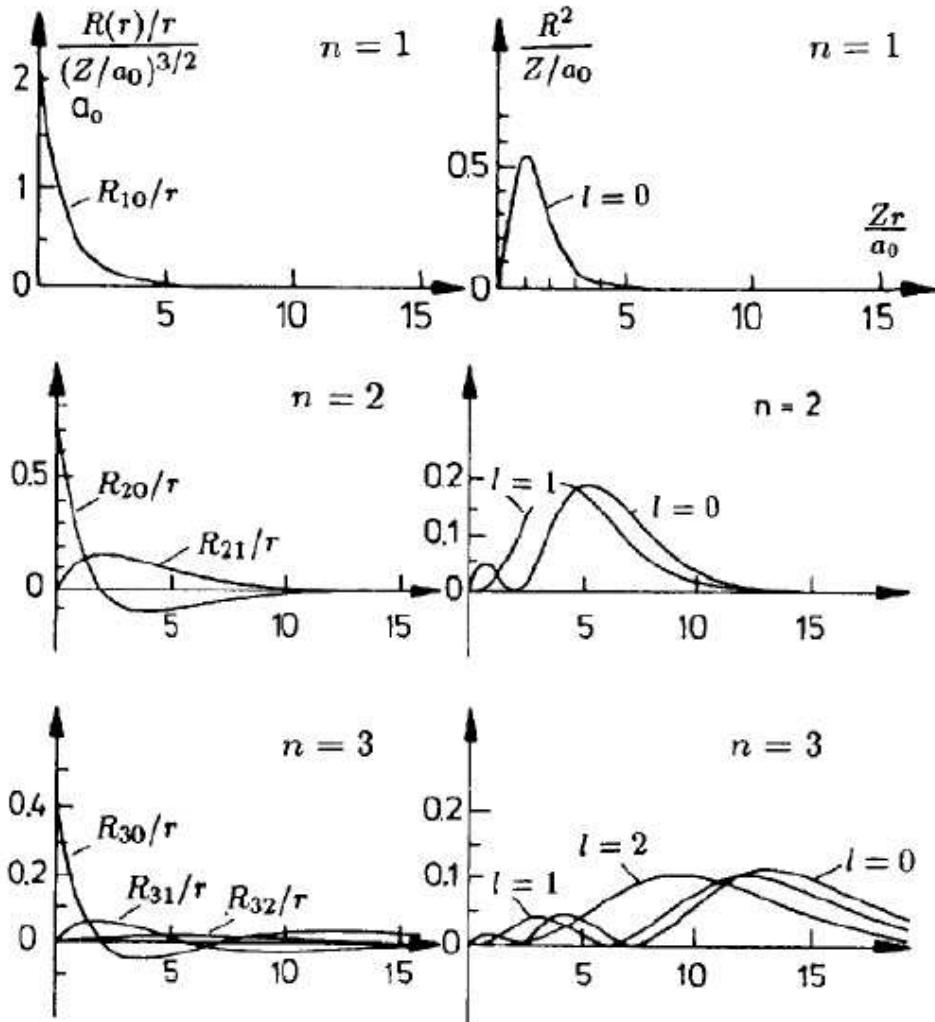
$$w_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) r^2 dr d\Omega = R_{nl}^2(r) dr |Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (6.29)$$

Integriranjem po $d\Omega$ dobijamo vjerovatnoću $w_{nl}(r) dr$ da se elektron nađe između dvije sferne površine radijusa r i $r + dr$:

$$w_{nl}(r) dr = w_{nlm}(r) r^2 dr = R_{nl}^2(r) dr. \quad (6.30)$$

Naprimjer, u stanju ψ_{100} vjerovatnoća je

$$w_{10}(r) dr = N_{10}^2 e^{-2r/a_0} r^2 dr, \quad (6.31)$$



Slika 6.1: Normirane radikalne talasne funkcije $R_{nl}(r)/r$ (lijeva strana) i normirane gustoće vjerovatnoće w_{nl} (desna strana) vodonikovog atoma za glavni kvantni broj $n = 1, 2$ i 3 .

gdje je N_{10} konstanta normiranja (6.25). Na slici 6.1 su prikazane radikalne talasne funkcije i vjerovatnoće kao funkcije r . Maksimum funkcije $R_{nl}^2(r)$, tj. najvjerojatnije rastojanje elektrona, za stanje ψ_{100} je jednako klasičnom Bohrovom radijusu $r_0 = a_0$, što je u skladu sa time da se prema klasičnoj teoriji elektron treba kretati oko jezgra po kružnici radijusa a_0 . Sa povećanjem glavnog kvantnog broja n maksimum raspodjele naboja se pomjera dalje od jezgra. Elektron je slabije vezan. Zavisno od vrijednosti radijalnog kvantnog broja $n_r = n - l - 1$ postoji više maksimuma – glavni maksimum i dodatni maksimumi.

Ako se radi o atomima čiji je naboј jezgra Z veći od jedan, trebamo zamijeniti a_0 sa a_0/Z i vjerovatnoća se povećava sa približavanjem jezgru kao $1/Z$, jer je elektron privučen jačom Coulombovom silom u orbitu bližu jezgru. Talasne funkcije vodonikovog atoma također opisuju stanja jona sa samo jednim elektronom, kao što su He^+ , Li^{++} , ... Jedina razlika je što treba zamijeniti e^2 u V_0 sa Ze^2 . Odgovarajuće opštije talasne funkcije su:

$$\psi_{nlm}^{(Z)}(\mathbf{r}) = N_{nl} r^l e^{-\frac{Z}{na_0}r} {}_1F_1(l+1-n; 2l+2; \frac{2Z}{na_0}r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (6.32)$$

Na osnovu veze degenerisane (konfluentne) hipergeometrijske funkcije ${}_1F_1$ i poopštenih Laguerreovih polinoma $L_n^{(\alpha)}$ uvodeći oznaku $\rho = \frac{2Z}{na_0}r$, dobijamo

$${}_1F_1(l+1-n; 2l+2; \rho) = \frac{(n-l-1)!(2l+1)!}{(n+l)!} L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\rho), \quad (6.33)$$

$$\psi_{nlm}^{(Z)}(\mathbf{r}) = 2 \left[\left(\frac{Z}{a_0 n} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{n(n+l)!} \right]^{1/2} \rho^l e^{-\rho/2} L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\rho) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (6.34)$$

6.4 Spektar vodonikovog atoma

Vrijednosti energije (6.21) karakterišu energetske nivoe vodonikovog atoma

$$E_n = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{2} \frac{V_0}{a_0} \frac{1}{n^2}. \quad (6.35)$$

Pri prelazu elektrona sa nivoa E_n na nivo $E_{n'}$ atom emituje foton energije

$$\hbar\omega_{nn'} = E_n - E_{n'} \quad (\text{Bohrov uslov za frekvenciju}). \quad (6.36)$$

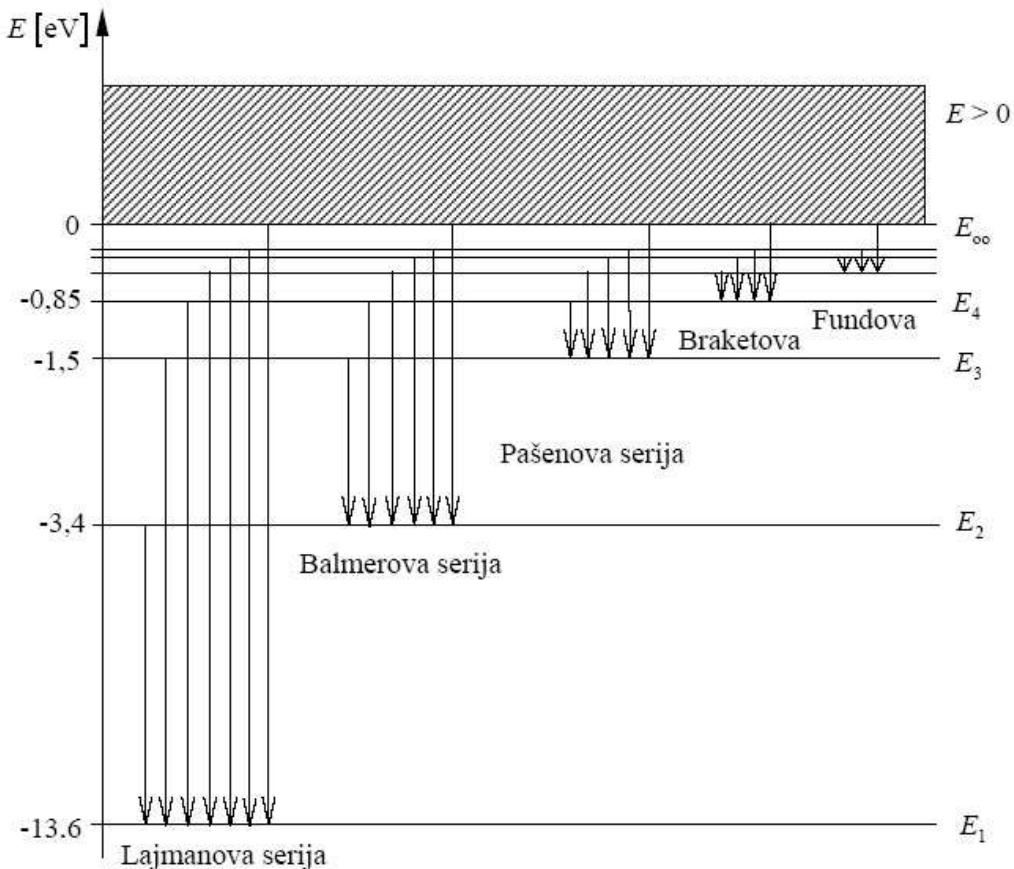
Uvrštavanjem (6.35) u (6.36) za ugaonu frekvenciju dobijamo:

$$\omega_{nn'} = \frac{mV_0^2}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n' < n, \quad (6.37)$$

a za frekvenciju

$$\nu_{nn'} = R \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (6.38)$$

gdje je $R = mV_0^2/(4\pi\hbar^3) = 3,27 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ Rydbergova konstanta. Veličina E_n/\hbar se naziva spektralni term. Razlika između termova E_n i $E_{n'}$ određuje ugaonu frekvenciju $\omega_{nn'}$. Na slici 6.2 je prikazan dijagram energetskih nivoa vodonikovog atoma i najvažniji prelazi. Sa porastom glavnog kvantnog broja



Slika 6.2: Energetski nivoi i spektralne serije vodonikovog atoma.

n razlika između energetskih nivoa opada, tj.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E_n = 0 \quad \text{i} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} (E_n - E_{n-1}) = 0. \quad (6.39)$$

Kontinuum opisuje jonizovani atom, a energija jonizacije je negativna energija veze.

Sve frekvencije koje su uključene u prelaze koji završavaju u istom nižem stanju formiraju *spektralnu seriju*. Prelaz u osnovno stanje $n' = 1$ tvori Lymanovu seriju. Frekvencije su

$$\nu = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 2, 3, \dots \quad (6.40)$$

Prelazi u stanja $n' = 2, 3, 4$ i 5 odgovaraju Balmerovo, Ritz-Paschenovo, Brakettovoj i Pfundovoj seriji. Vodoniku slični atomi u visoko-pobuđenim stanjima sa $n = 100$ su zapaženi u eksperimentima u zadnjih nekoliko decenija. Takvi atomi su nazvani *Rydbergovi atomi*. Njihov prečnik je oko 10^5 puta veći od prečnika atoma u osnovnom stanju.

6.5 Struje u vodonikovom atomu

Operator gustoće struje je dat sa

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2\mu}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi), \quad (6.41)$$

gdje je masa elektrona označena sa μ da bi se razlikovala od magnetnog kvantnog broja m , a ψ su vlastite funkcije vodonikovog atoma:

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = N_{nl} \frac{R_{nl}(r)}{r} P_l^{|m|}(\cos \vartheta) e^{im\varphi}. \quad (6.42)$$

Tu je $R_{nl}(r)$ radijalni dio a N_{nl} konstanta normiranja. Operator ∇ u sfernim koordinatama je dat sa

$$\nabla = \left\{ \frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta}, \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\}, \quad (6.43)$$

tako da su komponente gustoće struje

$$\begin{aligned} j_r^{(nlm)} &= \frac{i\hbar}{2\mu} \left(\psi_{nlm} \frac{\partial}{\partial r} \psi_{nlm}^* - \psi_{nlm}^* \frac{\partial}{\partial r} \psi_{nlm} \right), \\ j_\vartheta^{(nlm)} &= \frac{i\hbar}{2\mu} \left(\psi_{nlm} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \psi_{nlm}^* - \psi_{nlm}^* \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \psi_{nlm} \right), \\ j_\varphi^{(nlm)} &= \frac{i\hbar}{2\mu} \left(\psi_{nlm} \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_{nlm}^* - \psi_{nlm}^* \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_{nlm} \right). \end{aligned} \quad (6.44)$$

Odatle dobijamo

$$\begin{aligned} \psi_{nlm} \frac{\partial}{\partial r} \psi_{nlm}^* &= N_{nl}^2 \frac{R_{nl}(r)}{r} P_l^{|m|}(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \frac{R_{nl}(r)}{r} \left[P_l^{|m|}(\cos \vartheta) \right]^* e^{-im\varphi} \right\} \\ &= N_{nl}^2 \left[P_l^{|m|}(\cos \vartheta) \right]^2 \frac{R_{nl}(r)}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{R_{nl}(r)}{r} = \psi_{nlm}^* \frac{\partial}{\partial r} \psi_{nlm}, \end{aligned} \quad (6.45)$$

kao i

$$\psi_{nlm} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \psi_{nlm}^* = \psi_{nlm}^* \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \psi_{nlm}. \quad (6.46)$$

Pri tome smo koristili to da su $R_{nl}(r)$ i $P_l^{|m|}(\cos \vartheta)$ realne funkcije. Dakle, našli smo da je

$$j_r = j_\vartheta = 0. \quad (6.47)$$

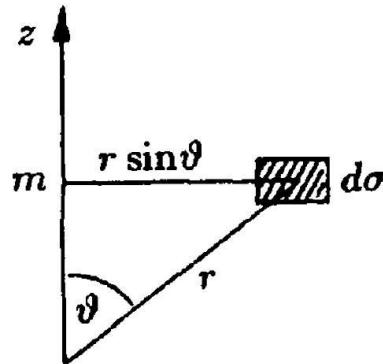
Ovo je očekivani rezultat zato što bi struja u radijalnom smjeru uzrokovala da se cijeli naboj skupi u jezgru ili da bude emitovan iz atoma nakon izvjesnog vremena.

Jedina komponenta struje koja je različita od nule je φ komponenta. Naime, prema zadnjoj jednačini u (6.44), to je jedina komponenta u kojoj se pojavljuje izvod kompleksnog dijela funkcije. Za gustoću struje u φ smjeru se dobija

$$j_\varphi = \frac{i\hbar}{2\mu} \left(\psi_{nlm} \frac{-im}{r \sin \vartheta} \psi_{nlm}^* - \psi_{nlm}^* \frac{im}{r \sin \vartheta} \psi_{nlm} \right) = \frac{\hbar m}{\mu r \sin \vartheta} |\psi_{nlm}|^2. \quad (6.48)$$

Ovo je intuitivno očekivani rezultat: kruženje elektrona oko jezgra je u skladu sa Bohrovim modelom i azimutalna struja je određena magnetnim kvantnim brojem m .

6.6 Magnetni moment atoma



Slika 6.3: Ilustracija uz proračun magnetnog momenta.

Ako sa $d\sigma$ označimo površinu okomito na smjer struje (vidjeti sliku 6.3), struja dI_φ koja prolazi kroz tu površinu je

$$dI_\varphi = j_\varphi d\sigma. \quad (6.49)$$

Iz elektrodinamike nam je poznato da električna struja dI koja kruži oko ravne površine F uzrokuje magnetni moment $dM = FdI$, čija je z komponenta u atomu data sa:

$$dM_z = FdI_\varphi = j_\varphi F d\sigma. \quad (6.50)$$

Gustoću struje čestica moramo pomnožiti sa nabojem $-e$ da bismo dobili električnu gustoću struje koja nam je potrebna. Pošto je $F = \pi r^2 \sin^2 \vartheta$, magnetni moment je

$$dM_z = \frac{-e\hbar m}{\mu r \sin \vartheta} |\psi_{nlm}|^2 \pi r^2 \sin^2 \vartheta d\sigma, \quad (6.51)$$

tj.

$$dM_z = -\frac{e\hbar m}{\mu} |\psi_{nlm}|^2 \pi r \sin \vartheta d\sigma. \quad (6.52)$$

Konačno je

$$M_z = -\frac{e\hbar m}{2\mu}, \quad (6.53)$$

jer je $dV = 2\pi r \sin \vartheta d\sigma$ zapremina elementa struje kroz $d\sigma$, a integral od $|\psi|^2$ za normiranu talasnu funkciju daje jedinicu. Pošto nema drugih struja u atomu, magnetni moment je

$$M = M_z = -\mu_B m, \quad (6.54)$$

gdje je $\mu_B = e\hbar/(2\mu)$ tzv. *Bohrov magneton*. Apsolutna vrijednost maksimalnog magnetnog momenta je $\mu_B l$, a minimalnog nula.

Ako zapazimo da je vrijednost z komponente ugaonog momenta $L_z = m\hbar$, dobijamo *žiromagnetni faktor* (kraće g faktor) elektrona u odnosu na ugaoni moment. On se definiše kao odnos apsolutne vrijednosti magnetnog momenta $|M_z|$ podijeljenog sa ugaonim momentom u jedinicama \hbar , tj.

$$g = \frac{|M_z|/\mu_B}{|L_z|/\hbar}. \quad (6.55)$$

Prema tome je $g = 1$. Po definiciji magnetni moment se mjeri u jedinicama μ_B , a ugaoni moment u jedinicama \hbar .

Elektron ima još jedan ugaoni moment – spin, tako da se g faktor može definisati i u odnosu na spin, što ćemo i uraditi kasnije.

Kao što smo vidjeli, zaista postoji realne električne struje u atomu, slično kao što je Bohr pretpostavio u svome modelu.

Poglavlje 7

Teorija reprezentacija

Stanje čestice je u potpunosti opisano normiranim talasnom funkcijom $\psi(\mathbf{r}, t)$ koju smo do sada koristili. U Schrödingerovoj jednačini

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t), \quad (7.1)$$

koja opisuje vremensku evoluciju stanja operator impulsa smo izražavali diferencijalnim operatorom:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla. \quad (7.2)$$

Ova reprezentacija stanja čestice se naziva *koordinatna reprezentacija*. Zbog Heisenbergovog principa neodređenosti impuls čestice \mathbf{p} nije egzaktno poznat ako je njena pozicija \mathbf{r} fiksirana. Srednji impuls, odnosno njegova očekivana vrijednost, je:

$$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) (-i\hbar \nabla) \psi(\mathbf{r}, t) dV. \quad (7.3)$$

Informacije o impulsu čestice možemo izvući iz talasne funkcije $\psi(\mathbf{r}, t)$ ako je razvijemo po vlastitim funkcijama operatora impulsa. To vodi na Fourierovu transformaciju:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int a(\mathbf{p}, t) \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar) d\mathbf{p} = \int a(\mathbf{p}, t) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d\mathbf{p}. \quad (7.4)$$

Ovdje je integriranje po cijelom impulsnom prostoru, a funkcija $a(\mathbf{p}, t)$ je Fourierova transformacija $\psi(\mathbf{r}, t)$ u trenutku t . Ravni talasi $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ su vlastite funkcije operatora impulsa:

$$\hat{\mathbf{p}}\psi_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}\psi_{\mathbf{p}}, \quad \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar). \quad (7.5)$$

Na osnovu jednačine (7.4) zaključujemo da funkcija $a(\mathbf{p}, t)$ opisuju stanje čestice podjednako kompletno kao i funkcija $\psi(\mathbf{r}, t)$. Funkciju $a(\mathbf{p}, t)$ nazivamo *impulsna reprezentacija* stanja čestice. Inverzna Fourierova transformacija od (7.4) je:

$$a(\mathbf{p}, t) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \psi(\mathbf{r}, t) \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar) d\mathbf{r} = \int \psi(\mathbf{r}, t) \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (7.6)$$

Prema tome, ako je $\psi(\mathbf{r}, t)$ poznato, tada možemo konstruisati $a(\mathbf{p}, t)$ prema (7.6), i obrnuto, ako je $a(\mathbf{p}, t)$ poznato, u stanju smo da konstruišemo $\psi(\mathbf{r}, t)$ koristeći (7.4). Takoder, može se pokazati ekvivalentnost uslova normiranja za funkcije $\psi(\mathbf{r}, t)$ i $a(\mathbf{p}, t)$ [vidjeti jednačinu (1.90) za slučaj normiranja u kocki]

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = \int |a(\mathbf{p}, t)|^2 d\mathbf{p}. \quad (7.7)$$

Relacija koja odgovara jednačini (7.3) za srednju vrijednost operatora položaja ima oblik:

$$\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle = \int a^*(\mathbf{p}, t) (i\hbar \nabla_{\mathbf{p}}) a(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p}, \quad (7.8)$$

gdje je $\nabla_{\mathbf{p}} = (\partial/\partial p_x, \partial/\partial p_y, \partial/\partial p_z)$ nabla operator u impulsnom prostoru. I zaista, koristeći (7.4) dobijamo

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle &= \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{p} d\mathbf{p}' a^*(\mathbf{p}, t) \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} a(\mathbf{p}', t) \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{p} d\mathbf{p}' a^*(\mathbf{p}, t) a(\mathbf{p}', t) \int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (7.9)$$

Na osnovu relacije

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) (-i\hbar \nabla_{\mathbf{p}'}) \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) \\ &= -i\hbar \nabla_{\mathbf{p}'} \int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) = -i\hbar \nabla_{\mathbf{p}'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \end{aligned} \quad (7.10)$$

jednačinu (7.4) možemo napisati u obliku

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle &= \int d\mathbf{p} d\mathbf{p}' a^*(\mathbf{p}, t) a(\mathbf{p}', t) (-i\hbar \nabla_{\mathbf{p}'}) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \\ &= -i\hbar \int d\mathbf{p} a^*(\mathbf{p}, t) \left[a(\mathbf{p}', t) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int d\mathbf{p}' \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \nabla_{\mathbf{p}'} a(\mathbf{p}', t) \right] \\ &= \int d\mathbf{p} a^*(\mathbf{p}, t) (i\hbar \nabla_{\mathbf{p}}) a(\mathbf{p}, t). \end{aligned}$$

Funkcija $a(\mathbf{p}, t)$ predstavlja raspodjelu impulsa stanja $\psi(\mathbf{r}, t)$ čestice, a veličina $|a(\mathbf{p}, t)|^2$ predstavlja vjerovatnoću da u stanju $\psi(\mathbf{r}, t)$ čestica ima određeni impuls \mathbf{p} , tj. da bude opisana talasnom funkcijom

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar).$$

Prema tome, $|a(\mathbf{p}, t)|^2$ je gustoća vjerovatnoće u impulsnom prostoru.

Do sada smo naša razmatranja bazirali na fizikalnom stanovištu da je koordinatna talasna funkcija $\psi(\mathbf{r}, t)$ određena mjenjem prostorne raspodjele čestice. Raspodjela impulsa se onda dobija Fourierovom transformacijom. Međutim, u fizici se često koristi obrnuti pristup. Npr., u eksperimentima rasijanja elektrona mjeri se raspodjela impulsa (tzv. form faktori). Nakon toga se prostorna raspodjela naboja u jezgru dobija Fourierovom analizom.

Koordinatna reprezentacija i impulsna reprezentacija su jednako pogodne za opis stanja čestice. Jednačine (7.4) i (7.6) omogućavaju prelaz sa jedne reprezentacije na drugu.

Razmotrimo sada ukratko energetsku reprezentaciju. Jednostavnosti radi, pretpostavit ćemo da čestica ima diskretan energetske spektar sa vlastitim vrijednostima energije $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$ i sa odgovarajućim sistemom ortonormiranih vlastitih funkcija $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$. Razvoj opšte talasne funkcije $\psi(\mathbf{r}, t)$ po tim vlastitim funkcijama je dat sa:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) \psi_n(\mathbf{r}), \quad (7.11)$$

gdje indeks n označava zavisnost od energije. Koeficijente razvoja u jednačini (7.11) možemo dobiti množeći tu jednačinu sa ψ_m^* i integrirajući po cijelom prostoru. Rezultat je:

$$a_m(t) = \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}. \quad (7.12)$$

Jasno je da je stanje čestice u potpunosti određeno skupom koeficijenata a_n , tj. energetskom reprezentacijom. I zaista, $\psi(\mathbf{r}, t)$ i $a_n(t)$ se mogu dobiti jedni iz drugih pomoću transformacija (7.11) i (7.12). Ovo je potpuno analogno prethodnoj situaciji kada smo bili u stanju da izračunamo $\psi(\mathbf{r}, t)$ iz $a(\mathbf{p}, t)$ pomoću (7.4) ili $a(\mathbf{p}, t)$ iz $\psi(\mathbf{r}, t)$ pomoću (7.6).

7.1 Reprezentacija (predstavljanje) operatora

Operatorska jednačina

$$\varphi = \hat{L}\psi \quad (7.13)$$

transformiše funkciju ψ u neku drugu funkciju φ . Za eksplisitne proračune trebamo izabrati određenu reprezentaciju. Do sada smo koristili koordinatnu \mathbf{r} da izrazimo operatore, tj. radili smo u *koordinatnoj reprezentaciji*. U tom slučaju, operator \hat{L} ima opšti oblik

$$\hat{L} = \hat{L}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) = \hat{L}(-i\hbar\nabla, \mathbf{r}). \quad (7.14)$$

Ako promijenimo reprezentaciju talasne funkcije, moramo da transformišemo i operator u skladu s tim.

Razmotrimo prvo *energetsku reprezentaciju*. Razvit ćemo talasne funkcije $\psi(\mathbf{r})$ i $\varphi(\mathbf{r})$ u jednačini (7.13) po vlastitim funkcijama energije, tj. hamiltonijana ($\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$). Vrijedi:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n a_n \psi_n(\mathbf{r}), \quad \varphi(\mathbf{r}) = \sum_n b_n \psi_n(\mathbf{r}). \quad (7.15)$$

Prema rezultatima prethodnog odjeljka energetska reprezentacija funkcija ψ i φ je data skupom koeficijenata a_n i b_n . Da bismo dobili energetsku reprezentaciju operatora \hat{L} uvrstit ćemo razvoje (7.15) u (7.13):

$$\sum_n b_n \psi_n = \sum_n a_n \hat{L} \psi_n. \quad (7.16)$$

Nakon množenja sa ψ_m^* i integriranja po prostoru dobijamo

$$\sum_n b_n \delta_{mn} = \sum_n a_n \int \psi_m^* \hat{L} \psi_n dV. \quad (7.17)$$

Uvođenjem *matričnog elementa*

$$L_{mn} = \int \psi_m^* \hat{L} \psi_n dV \quad (7.18)$$

jednačinu (7.17) možemo prepisati u obliku

$$b_m = \sum_n L_{mn} a_n. \quad (7.19)$$

Ova jednačina predstavlja energetsku reprezentaciju relacije (7.13). Kažemo da matrični elementi L_{mn} čine energetsku reprezentaciju operatora \hat{L} . Pošto indeksi m i n poprimaju vrijednosti iz istog skupa brojeva i pošto je broj vlastitih vrijednosti energije beskonačan, matrica čiji su matrični elementi L_{mn} je beskonačna kvadratna matrica.

Da bismo dali primjer operatora sa kontinuiranim vlastitim vrijednostima energije, izračunajmo impulsnu reprezentaciju od (7.13). Problem se pojednostavljuje ako razmotrimo jednodimenzionalni slučaj ($\mathbf{r} \rightarrow x$, $\mathbf{p} \rightarrow p_x \equiv p$). Pošto nas interesuje impulsna reprezentacija, izvršit ćemo razvoj po vlastitim funkcijama operatora impulsa, tj.

$$\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(ipx/\hbar). \quad (7.20)$$

Vrijedi

$$\psi(x) = \int a(p)\psi_p(x)dp, \quad \varphi(x) = \int b(p)\psi_p(x)dp. \quad (7.21)$$

Funkcije $a(p)$ i $b(p)$ su impulsna reprezentacija od $\psi(x)$ i $\varphi(x)$. Uvrštavanjem (7.20) u (7.13) dobijamo:

$$\int b(p)\psi_p(x)dp = \hat{L} \int a(p)\psi_p(x)dp = \int a(p)\hat{L}\psi_p(x)dp, \quad (7.22)$$

gdje smo iskoristili da je operator \hat{L} dat u koordinatnoj reprezentaciji (7.14) i da zavisi od x a ne od p , tako da se može uvući pod integral. Množenjem sa $\psi_{p'}^*(x)$ i integriranjem po dx dobijamo

$$\int b(p)dp \int \psi_{p'}^*(x)\psi_p(x)dx = \int a(p)dp \int \psi_{p'}^*(x)\hat{L}\psi_p(x)dx. \quad (7.23)$$

Koristeći relaciju ortogonalnosti

$$\int \psi_{p'}^*(x)\psi_p(x)dx = \delta(p' - p) \quad (7.24)$$

i uvodeći skraćenu oznaku

$$L_{p'p} = \int \psi_{p'}^*(x)\hat{L}\psi_p(x)dx \quad (7.25)$$

dobijamo impulsnu reprezentaciju od (7.13):

$$b_{p'} = \int L_{p'p}a(p)dp. \quad (7.26)$$

Indeksi p' i p su kontinuirani i, prema tome, matrični element $L_{p'p} = L(p', p)$ je funkcija varijabli p' i p . Beskonačna matrica $(L_{p'p})$ je impulsna reprezentacija od \hat{L} .

Neka su talasne funkcije $\varphi(x)$ i $\psi(x)$ predstavljene brojevima b_n i a_n . Uvedimo matrice kolone (stupce)

$$a \equiv (a_n) = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad b \equiv (b_n) = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (7.27)$$

Zamijenimo jednačinu $\varphi = \hat{L}\psi$, koja je ekvivalentna jednačini $b_m = \sum_n L_{mn}a_n$, sa matričnom jednačinom

$$(b_n) = (L_{mn})(a_n), \quad \text{tj.} \quad b = La, \quad (7.28)$$

gdje $(L_{mn}) \equiv L$ odgovara operatoru \hat{L} . Eksplicitni oblik te jednačine je

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & \cdots \\ L_{21} & L_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (7.29)$$

Matrice a i b nazivamo *matrična reprezentacija* talasnih funkcija ψ i φ u izabranoj bazi ψ_k .

Očekivana vrijednost $\langle\psi|\hat{L}|\psi\rangle$ operatora u stanju $\psi(x)$ u matričnoj reprezentaciji ima oblik

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{L}|\psi\rangle &= \int \psi^*(x)\hat{L}\psi(x)dx = \int dx \sum_{n,m} a_n^*\psi_n^*(x)\hat{L}(x)a_m\psi_m(x) \\ &= \sum_{n,m} a_n^*a_m \int dx \psi_n^*(x)\hat{L}(x)\psi_m(x) = \sum_{n,m} a_n^*L_{nm}a_m \\ &= (a_1^* \ a_2^* \ \cdots) \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & \cdots \\ L_{21} & L_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.30)$$

Rezultati dobijeni u ovom odjeljku su vrlo važni. Naučili smo da pored koordinatne reprezentacije postoji čitav niz reprezentacija pomoću kojih se izražavaju kvantno-mehaničke relacije. Razmotrimo sada matričnu reprezentaciju nekih operatora.

- Matrica operatora koordinate \hat{x} u konfiguracionom prostoru

Pokazat ćemo da je matrični oblik koordinate \hat{x} u x reprezentaciji dat sa

$$x_{x'x} = x'\delta(x - x'). \quad (7.31)$$

I zaista, na osnovu zakona množenja matrica dobijamo

$$\varphi(x') = \int_{-\infty}^{\infty} x' x \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x' \delta(x - x') \psi(x) dx = x' \psi(x'), \quad (7.32)$$

tj. matrica za x daje ispravan faktor (vlastitu vrijednost) x' u jednačini $\varphi(x') = x' \psi(x')$. Prema tome, $x' x = x' \delta(x - x')$ zovemo *matričnim oblikom* koordinate \hat{x} u x reprezentaciji.

- Matrica od $V(x)$ u konfiguracionom prostoru

Neka je $V(x)$ proizvoljna funkcija koordinate x . Kao i ranije, uvrstit ćemo $V_{x'x} = V(x') \delta(x - x')$ u jednačinu

$$\varphi(x) = V(x) \psi(x). \quad (7.33)$$

Dobijamo

$$\varphi(x') = \int_{-\infty}^{\infty} V_{x'x} \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} V(x') \delta(x - x') \psi(x) dx = V(x') \psi(x'). \quad (7.34)$$

Očito, jednačine (7.33) i (7.34) su identične. Prema tome, $V_{x'x} = V(x') \delta(x - x')$ je matrični oblik potencijala $V(x)$ u koordinatnoj (x) reprezentaciji.

- Matrični oblik operatora impulsa u konfiguracionom prostoru (x reprezentaciji)

Traženi matrični oblik je

$$\hat{p}_{x'x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x' - x). \quad (7.35)$$

Provjerit ćemo taj rezultat uvrštavanjem u

$$\varphi(x) = \hat{p}\psi(x). \quad (7.36)$$

Dobijamo

$$\varphi(x') = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{p}_{x'x} \psi(x) dx = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x' - x) \psi(x) dx. \quad (7.37)$$

Parcijalnom integracijom nalazimo da je

$$\varphi(x') = i\hbar [\delta(x' - x) \psi(x)]_{-\infty}^{\infty} - i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x' - x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) dx. \quad (7.38)$$

Prvi član je jednak nuli tako da je

$$\varphi(x') = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x' - x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) dx = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \psi(x'), \quad (7.39)$$

što je standardni oblik od (7.36), čime smo provjerili jednačinu (7.35).

7.2 Problem vlastitih vrijednosti

Važan i čest problem u kvantnoj mehanici je nalaženje vlastitih vrijednosti i vlastitih funkcija datog operatora \hat{A} . Ako je operator \hat{A} dat u reprezentaciji svojih vlastitih funkcija dijagonalni elementi odgovarajuće matrice A_{mn} su upravo njegove vlastite vrijednosti. Sada ćemo razviti metod nalaženja vlastitih vrijednosti i vlastitih funkcija operatora \hat{A} ako on nije dat u svojoj vlastitoj reprezentaciji.

Vlastite funkcije ψ_a operatora \hat{A} zadovoljavaju jednačinu

$$\hat{A}\psi_a(x) = a\psi_a(x). \quad (7.40)$$

Razvit ćemo te vlastite funkcije po funkcijama φ_n koje nisu vlastite funkcije operatora \hat{A} :

$$\psi_a(x) = \sum_n c_n^a \varphi_n(x). \quad (7.41)$$

Kombinovanjem jednačina (7.40) i (7.41) dobijamo

$$\hat{A} \sum_n c_n^a \varphi_n = a \sum_n c_n^a \varphi_n. \quad (7.42)$$

Množenjem sa φ_k^* i integriranjem nalazimo da je

$$\sum_n c_n^a A_{kn} = ac_k^a, \quad (7.43)$$

gdje smo uveli skraćenu oznaku

$$A_{kn} = \int \varphi_k^* \hat{A} \varphi_n dV. \quad (7.44)$$

Prepostavimo sada da su matrični elementi A_{kn} zadani i da za datu matricu (A_{kn}) treba izračunati vlastite vrijednosti a i koeficijente c_n^a u jednačini (7.43). Ako ih nađemo problem vlastitih vrijednosti će biti riješen u proizvoljnoj reprezentaciji pošto pomoću c_n^a koristeći relaciju (7.41) možemo konstruisati vlastite funkcije od \hat{A} , tj. $\psi_a(x)$ u x reprezentaciji. Da bismo našli c_n^a uobičajeno je prepisati jednačinu (7.43) u obliku

$$\sum_n (A_{kn} - a\delta_{kn}) c_n^a = 0. \quad (7.45)$$

Ova jednačina predstavlja beskonačni homogeni sistem jednačina za koeficijente c_n^a . Takav sistem ima netrivijalno rješenje ako je determinanta njegovih koeficijenata jednaka nuli, tj.

$$\det(A_{kn} - a\delta_{kn}) = 0. \quad (7.46)$$

Problem je što je u opštem slučaju ta determinanta beskonačna. Da bismo riješili (7.46) razmotrit ćemo sekularnu determinantu N -tog stepena:

$$D_N(a) = \begin{vmatrix} A_{11} - a & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} - a & \cdots & A_{2N} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \cdots & A_{NN} - a \end{vmatrix} = 0. \quad (7.47)$$

Tu smo odsjekli razvoj (7.41) na određenoj vrijednosti $n = N$. Konvergenciju ćemo provjeriti povećavanjem parametra N . Jednačina $D_N(a) = 0$ je N -tog stepena i ima N rješenja za a . Ta rješenja

$$a_1^{(N)}, a_2^{(N)}, \dots, a_N^{(N)} \quad (7.48)$$

su sva realna zato što je $D_N(a)$ determinanta hermitske matrice (prepostavili smo da je \hat{A} hermitski operator zato što u kvantnoj mehanici takvi trebaju biti svi operatori koji su pridruženi opservablama).

Sada ćemo izračunati vlastite vrijednosti a_i za niz determinanti D_N sa rastućim vrijednostima N i dobiti niz rješenja:

$$a_i^{(1)}, a_i^{(2)}, \dots, a_i^{(N)} \rightarrow a_i. \quad (7.49)$$

Ovaj niz konvergira iz fizikalnih razloga. Naime, matrični elementi A_{kn} su mjera korelacije između stanja φ_k i φ_n . Za $n \gg k$ ta korelacija je zanemarljiva (npr. visoko pobuđena stanja slabo utiču na osnovno stanje). Tada A_{kn} postaju vrlo mali i njihov doprinos prvim korjenima sekularne determinante je zanemarljiv.

Uvrštavanjem tako izračunatih vrijednosti a_i u (7.46) dobijamo koeficijente $c_n^{a_i}$ i, pomoću (7.41), vlastite funkcije

$$\psi_{a_i}(x) = \sum_n c_n^{a_i} \varphi_n(x). \quad (7.50)$$

Ako je spektar operatora kontinuiran tada sume treba zamijeniti integralima i jednačina (7.46) postaje Fredholmova integralna jednačina druge vrste:

$$\int A(\xi', \xi) c(\xi) d\xi = ac(\xi'). \quad (7.51)$$

Takvi problemi se pojavljuju npr. u kvantnoj elektrodinamici. Ovdje ih nećemo razmatrati.

7.3 Unitarne transformacije

Operator \hat{A} se može predstaviti pomoću matrice na više načina. Za proizvoljni kompletan skup talasnih funkcija ψ_n možemo konstruisati odgovarajuću reprezentaciju operatora \hat{A} . U ovom odjeluću ćemo razmotriti transformacione osobine tih matrica pri promjeni reprezentacije.

Operator \hat{A} se može dati u reprezentaciji sa baznim funkcijama $\psi_n(\mathbf{r})$ koje su vlastite funkcije operatora \hat{L} , tj. $\hat{L}\psi_n(\mathbf{r}) = L_n\psi_n(\mathbf{r})$. Tada je

$$A_{mn} = \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \hat{A} \psi_n(\mathbf{r}) dV \quad (7.52)$$

L reprezentacija operatora \hat{A} . S druge strane, također je moguća reprezentacija operatora \hat{A} sa vlastitim funkcijama $\varphi_\mu(\mathbf{r})$ od operatora \hat{M} :

$$A_{\mu\nu} = \int \varphi_\mu^*(\mathbf{r}) \hat{A} \varphi_\nu(\mathbf{r}) dV, \quad \hat{M}\varphi_\mu(\mathbf{r}) = M_\mu \varphi_\mu(\mathbf{r}). \quad (7.53)$$

Da bimo razlikovali te dvije reprezentacije koristimo latinske indekse za *L* reprezentaciju i grčke indekse za *M* reprezentaciju.

Sada ćemo odrediti matricu transformacije koja povezuje (A_{mn}) sa $(A_{\mu\nu})$. U tu svrhu, razvit ćemo vlastite funkcije od \hat{M} po vlastitim funkcijama od \hat{L} :

$$\varphi_\mu = \sum_n S_{n\mu} \psi_n. \quad (7.54)$$

Množenjem sa ψ_m^* i integriranjem dobijamo

$$\int \psi_m^* \varphi_\mu dV = \sum_n S_{n\mu} \delta_{mn} = S_{m\mu}. \quad (7.55)$$

Očito je da su matrični elementi $S_{m\mu}$ projekcija ψ_m na stanje φ_μ . Uvrštavanjem (7.54) u prvu relaciju u (7.53) dobijamo

$$\begin{aligned} A_{\mu\nu} &= \int \sum_n S_{n\mu}^* \psi_n^* \hat{A} \sum_m S_{m\nu} \psi_m dV = \sum_{n,m} S_{n\mu}^* S_{m\nu} \int \psi_n^* \hat{A} \psi_m dV \\ &= \sum_{n,m} S_{n\mu}^* A_{nm} S_{m\nu}. \end{aligned} \quad (7.56)$$

Uvodeći adjungiranu matricu

$$(\tilde{S})_{n\mu}^* = (S_{\mu n}^\dagger), \quad \text{tj.} \quad S^\dagger = \tilde{S}^*, \quad (7.57)$$

nalazimo vezu između matrica koje odgovaraju operatoru \hat{A} u dvije reprezentacije:

$$(A_{\mu\nu}) = \sum_{n,m} (S_{\mu n}^{\dagger}) (A_{nm}) (S_{m\nu}), \quad (7.58)$$

odnosno, ako označimo matrice samo velikim slovima:

$$A_M = S^{\dagger} A_L S. \quad (7.59)$$

Indeksi M i L se odnose na različite reprezentacije od \hat{A} . Zahtjev da su i ψ_n i φ_{μ} ortonormirane talasne funkcije vodi na to da je matrica S unitarna. Pokažimo to:

$$\begin{aligned} \delta_{\mu\nu} &= \int \varphi_{\mu}^{*} \varphi_{\nu} dV = \int \sum_m S_{m\mu}^{*} \psi_m^{*} \sum_n S_{n\nu} \psi_n dV = \sum_{n,m} S_{m\mu}^{*} S_{n\nu} \delta_{mn} \\ &= \sum_m S_{m\mu}^{*} S_{m\nu} = (S^{\dagger} S)_{\mu\nu}, \end{aligned} \quad (7.60)$$

tj. proizvod matrice S i njoj adjungirane matrice S^{\dagger} je jednak jediničnoj matrici:

$$S^{\dagger} S = \mathbb{I}. \quad (7.61)$$

Unitarnost također znači ekvivalentnost adjungirane matrice S^{\dagger} i inverzne matrice S^{-1} . Treba napomenuti da unitarna matrica nije obavezno i hermit-ska:

$$S^{\dagger} = S^{-1} \neq S. \quad (7.62)$$

Fizikalno značenje unitarne transformacije (7.54) je očuvanje vjerovatnoće: ako je čestica u stanju φ_{μ} sa vjerovatnoćom 1, tada se ona može naći sa vjerovatnoćom $|S_{\mu n}|^2$ u stanjima ψ_n . Skup $|S_{\mu 1}|^2, \dots, |S_{\mu n}|^2, \dots$ daje raspodjelu vjerovatnoće čestice u odnosu na stanja ψ_n . Prema tome, mora da vrijedi $\sum_n |S_{\mu n}|^2 = \sum_n S_{\mu n}^{*} S_{\mu n} = 1$, tj. matrica S je unitarna.

Važan i često korišteni teorem je teorem o invarijantnosti traga matrice u odnosu na unitarnu transformaciju. Trag matrice se označava sa $\text{tr}A$ i definisan je kao suma dijagonalnih elemenata matrice. Prema relacijama (7.56) i (7.60) dobijamo

$$\begin{aligned} \text{tr}A_M &= \sum_{\mu} A_{\mu\mu} = \sum_{\mu} \sum_{n,m} S_{n\mu}^{*} A_{nm} S_{m\mu} = \sum_{\mu,n,m} A_{nm} S_{m\mu} S_{n\mu}^{*} \\ &= \sum_{n,m} A_{nm} (S S^{\dagger})_{mn} = \sum_{n,m} A_{nm} \delta_{mn} = \sum_n A_{nn} = \text{tr}A_L. \end{aligned} \quad (7.63)$$

Prema tome, vrijedi $\text{tr}A_M = \text{tr}A_L$, tj. trag matrice ne zavisi od izbora reprezentacije.

7.4 S matrica

Vremenska evolucija sistema se može opisati nizom unitarnih transformacija. Operator transformacije vremenske evolucije se označava sa \hat{S} , a odgovarajuća matrica se naziva S matrica [naziv potiče od eng. scattering matrix – matrica rasijanja; koristi se i oznaka $\hat{U}(t, t_0)$ za unitarni operator vremenske evolucije sistema od trenutka t_0 do trenutka t]. Izvest ćemo sada izraz za operator \hat{S} i analizirati neke od njegovih osobina.

Operator \hat{S} transformiše stanje iz trenutka $t_0 = 0$ u stanje u trenutku t :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \hat{S}\psi(\mathbf{r}, 0). \quad (7.64)$$

Možemo ga dobiti ako uvrstimo talasnu funkciju $\psi(\mathbf{r}, t)$ u vremenski zavisnu Schrödingerovu jednačinu:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \hat{S}\psi(\mathbf{r}, 0) = \left(i\hbar \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} - \hat{H}\hat{S} \right) \psi(\mathbf{r}, 0) = 0, \quad (7.65)$$

odakle slijedi da je

$$i\hbar \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} = \hat{H}\hat{S}. \quad (7.66)$$

U slučaju kada hamiltonijan \hat{H} ne zavisi eksplicitno od vremena dobijamo slijedeći rezultat:

$$\hat{S} = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t \right). \quad (7.67)$$

Na osnovu jednačine (7.64) slijedi da je $\hat{S}(0) = \mathbb{I}$, što nam je poslužilo da izaberemo konstantu integriranja u (7.67). Kada primjenjujemo operator \hat{S} na neku funkciju, kao u jednačini (7.64), mi ustvari razvijamo eksponencijalnu funkciju u stepeni red:

$$\hat{S} = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t \right) = \sum_n \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t \right)^n. \quad (7.68)$$

Posebnu pažnju ćemo posvetiti energetskoj reprezentaciji u kojoj je operator \hat{H} dijagonalan, tj. $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$. Ako je

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \sum_n a_n \psi_n(\mathbf{r}), \quad (7.69)$$

tada vremensku evoluciju stanja $\psi(\mathbf{r}, 0)$ dobijamo primjenom operatora \hat{S}

prema jednačini (7.64). Vrijedi:

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}, t) &= \hat{S}\psi(\mathbf{r}, 0) = \sum_n a_n \hat{S}\psi_n = \sum_n a_n \sum_k \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right)^k \psi_n \\ &= \sum_n a_n \sum_k \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)^k \psi_n = \sum_n a_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \psi_n.\end{aligned}\quad (7.70)$$

Očito, dobili smo dobro poznatu vremensku zavisnost stacionarnih stanja. U energetskoj reprezentaciji operator \hat{S} je dijagonalan:

$$S_{mn} = \int \psi_m^* \hat{S} \psi_n dV = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \delta_{mn}. \quad (7.71)$$

Jednačina (7.68) pokazuje i da je operator \hat{S} unitaran:

$$\hat{S}^\dagger = \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \right]^\dagger = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}^\dagger t\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) = \hat{S}^{-1}, \quad (7.72)$$

jer je \hat{H} hermitski operator. Sada ćemo razviti talasnu funkciju $\psi(\mathbf{r}, t)$ po vlastitim funkcijama φ_n operatora \hat{L} :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n b_n(t) \varphi_n(\mathbf{r}). \quad (7.73)$$

Ako opet opišemo vremensku evoluciju pomoću operatora \hat{S} dobijamo

$$\sum_n b_n(t) \varphi_n(\mathbf{r}) = \sum_n \hat{S} b_n(0) \varphi_n(\mathbf{r}). \quad (7.74)$$

Množenjem sa φ_m^* i integriranjem slijedi matrična diferencijalna jednačina:

$$b_m(t) = \sum_n S_{mn}(t) b_n(0), \quad (7.75)$$

gdje je $S_{mn} = \int \varphi_m^* \hat{S} \varphi_n dV$. Razmotrimo sada specijalni slučaj $b_{n_i}(0) = 1$. Tada su svi drugi $b_n(0)$, $n \neq n_i$, jednaki nuli zbog uslova normiranja. To znači da je u L reprezentaciji, u trenutku $t = 0$, čestica u potpunosti u stanju $\varphi_{n_i}(\mathbf{r})$. Kažemo da je sistem pripremljen tako da je u početnom trenutku (inicijalno) u stanju $\varphi_{n_i}(\mathbf{r})$. Prema tome, jednačina (7.75) vodi na:

$$b_m(t) = S_{mn_i}(t). \quad (7.76)$$

To je interesantan rezultat sa očiglednom fizikalnom interpretacijom. Matični element predstavlja $S_{mn_i}(t)$ amplitudu vjerovatnoće da sistem pređe iz stanja φ_{n_i} u stanje φ_m nakon vremena t . Drugim riječima, veličina

$$w(n_i \rightarrow m) = |S_{mn_i}(t)|^2 \quad (7.77)$$

nam daje vjerovatnoću prelaza iz stanja φ_{n_i} u stanje φ_m pod uticajem \hat{H} . Ova relacija igra važnu ulogu u proračunima vjerovatnoće prelaza u kvantnoj mehanici i u kvantnoj elektrodinamici.

7.5 Schrödingerova jednačina u matričnom obliku

Kao primjer do sada razvijenog formalizma pogledat ćemo rješenje Schrödingerove jednačine

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \quad (7.78)$$

i koristiti energetsku reprezentaciju za talasnu funkciju, tj. vlastitu reprezentaciju hamiltonijana za koji pretpostavljamo da ne zavisi eksplisitno od vremena

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n. \quad (7.79)$$

Razvojem talasne funkcije po vlastitim funkcijama hamiltonijana:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t)\psi_n(\mathbf{r}), \quad (7.80)$$

uvrštavanjem u Schrödingerovu jednačinu dobijamo

$$i\hbar \sum_n \frac{\partial a_n(t)}{\partial t} \psi_n(\mathbf{r}) = \sum_n E_n a_n(t) \psi_n(\mathbf{r}). \quad (7.81)$$

Množenjem sa ψ_m^* i integriranjem nalazimo da je

$$i\hbar \frac{\partial a_m(t)}{\partial t} = E_m a_m(t). \quad (7.82)$$

Upravo to što smo koristili energetska reprezentacija od \hat{H} sa $H_{mn} = E_n \delta_{mn}$ je razlog zašto diferencijalne jednačine za $a_m(t)$ nisu spregnute (povezane). Rješenje jednačine (7.82) je

$$a_m(t) = a_m(0) \exp(-iE_m t/\hbar). \quad (7.83)$$

Amplitude stacionarnih stanja su vremenski zavisne. Konstanta integriranja se dobila iz početnih uslova. Ako koristimo reprezentaciju koja je različita od energetske reprezentacije dobit ćemo spregnuti sistem diferencijalnih jednačina za amplitude $a_m(t)$.

Sada ćemo na sličan način izračunati vremensku promjenu srednje vrijednosti operatora \hat{L} koja je data sa

$$\langle \hat{L} \rangle = \int \psi^* \hat{L} \psi dV. \quad (7.84)$$

Uvrštavanjem razvoja (7.80) dobijamo:

$$\langle \hat{L} \rangle = \int \sum_m a_m^*(t) \psi_m^*(\mathbf{r}) \hat{L} \sum_n a_n(t) \psi_n(\mathbf{r}) dV = \sum_{n,m} a_m^*(t) L_{mn} a_n(t), \quad (7.85)$$

gdje smo koristili definiciju (7.18) matričnog elementa L_{mn} . Jednačina (7.85) daje srednju vrijednost operatora u matričnoj reprezentaciji kao funkciju vremena. Izvod srednje vrijednosti po vremenu je

$$\frac{d\langle \hat{L} \rangle}{dt} = \sum_{n,m} \frac{\partial a_m^*}{\partial t} L_{mn} a_n + \sum_{n,m} a_m^* \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} a_n + \sum_{n,m} a_m^* L_{mn} \frac{\partial a_n}{\partial t}. \quad (7.86)$$

Izvođenjem analognom onome kada smo iz jednačine (7.78) dobili relaciju (7.81) možemo vremenski izvod koeficijenata $a_m(t)$ predstaviti u obliku

$$i\hbar \frac{\partial a_n(t)}{\partial t} = \sum_k H_{nk} a_k(t), \quad (7.87)$$

gdje su sa H_{nk} označeni matrični elementi hamiltonijana. Relacija (7.87) predstavlja Schrödingerovu jednačinu u matričnoj reprezentaciji.¹ Ova relacija vrijedi u proizvoljnoj reprezentaciji. U energetskoj reprezentaciji (7.79) ona se redukuje na sistem nespregnutih diferencijalnih jednačina (7.82). Ako uvrstimo (7.87) i njoj kompleksno konjugovanu formulu u $d\langle \hat{L} \rangle/dt$, jednačina (7.86), dobijamo:

$$\frac{d\langle \hat{L} \rangle}{dt} = -\frac{1}{i\hbar} \sum_{m,n,k} a_k^* H_{mk}^* L_{mn} a_n + \sum_{m,n} a_m^* \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} a_n + \frac{1}{i\hbar} \sum_{m,n,k} a_m^* L_{mn} a_k H_{nk}. \quad (7.88)$$

¹W. Heisenberg je 1925. godine uveo matrične elemente kao kvantno-mehanički analog Fourierovih amplituda iz klasične mehanike. Upravo onako kako je neka klasična veličina određena svojom Fourierovom amplitudom, tako je i odgovarajuća kvantno-mehanička veličina data svim svojim matričnim elementima. Heisenberg nije u početku koristio izraz "matrični element". Born i Jordan su prvi uočili da su zakoni množenja kvantno-mehaničkih veličina koje je dao Heisenberg identični običnom matričnom množenju. Cijela ta teorija je dalje razvijena i čvrsto ustanovljena u toku 1926. godine pomoću matričnog računa.

Pošto je hamiltonijan hermitski operator to je

$$H_{mk}^* = H_{km}, \quad (7.89)$$

tako da, uz promjenu redoslijeda indeksa [$m, n, k \rightarrow n, k, m$ u prvom članu na desnoj strani u jednačini (7.88)], dobijamo:

$$\frac{d\langle \hat{L} \rangle}{dt} = \sum_{m,n} a_m^* \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} a_n + \frac{1}{i\hbar} \sum_{m,k} a_m^* \sum_n (L_{mn} H_{nk} - L_{nk} H_{mn}) a_k. \quad (7.90)$$

Koristeći pravilo množenja matrica i uvodeći proizvode operatora gornja relacija se može svesti na

$$\frac{d\langle \hat{L} \rangle}{dt} = \sum_{m,k} a_m^* \frac{\partial L_{mk}}{\partial t} a_k + \frac{1}{i\hbar} \sum_{m,k} a_m^* (\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L})_{mk} a_k. \quad (7.91)$$

Kombinujući dvostruku sumu i uvodeći komutator $[\hat{H}, \hat{L}]$ dobijamo

$$\frac{d\langle \hat{L} \rangle}{dt} = \sum_{m,k} a_m^* \left\{ \frac{\partial L_{mk}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}]_{mk} \right\} a_k. \quad (7.92)$$

Stavljujući $d\langle \hat{L} \rangle/dt = \langle d\hat{L}/dt \rangle$ i koristeći jednačinu (7.85) dobijamo slijedeći rezultat za matrični element vremenske promjene operatora:

$$\left(\frac{d\hat{L}}{dt} \right)_{mn} = \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}]_{mn}. \quad (7.93)$$

Ovaj rezultat smo već koristili kada smo razmatrali Ehrenfestov teorem. Ovdje smo ga predstavili u matričnom obliku.

7.6 Schrödingerova reprezentacija

U dosadašnjem opisu dinamičke evolucije fizikalnog sistema koristili smo *vremenski zavisne funkcije stanja* $\psi(\mathbf{r}, t)$. Fizikalne veličine, bar one koje ne zavise eksplicitno od vremena, su opisivane sa *vremenski nezavisnim operatorima*. Takav tip opisivanja nazivamo *Schrödingerovom reprezentacijom* ili *Schrödingerovom slikom*.

7.7 Heisenbergova reprezentacija

U Heisenbergovoj reprezentaciji (Heisenbergovoj slici) situacija je obrnuta u odnosu na Schrödingerovu: talasne funkcije su *vremenski nezavisne*, a dinamička evolucija je opisana *vremenskim zavisnim operatorima*.

Ove dvije reprezentacije su u potpunosti ekvivalentne pri opisu sistema i vode na iste očekivane vrijednosti, iste spektre itd. Prelaz sa jedne reprezentacije na drugu je dat unitarnom vremenski zavisnom transformacijom, kao što ćemo pokazati u narednom dijelu ovoga odjeljka.

Da bismo objasnili različite tipove reprezentacija analizirat ćemo matrični element nekog operatora \hat{L} :

$$L_{mn}(t) = \int \psi_m^*(\mathbf{r}, t) \hat{L} \psi_n(\mathbf{r}, t) dV. \quad (7.94)$$

Talasnu funkciju ćemo predstaviti u energetskoj reprezentaciji

$$\psi_m(\mathbf{r}, t) = \psi_m(\mathbf{r}) \exp(-iE_m t/\hbar). \quad (7.95)$$

Vremenska zavisnost stacionarnih stanja je data eksponencijalnim faktorom. Uvrštanjem te relacije u integral (7.94) dobijamo

$$\begin{aligned} L_{mn}(t) &= \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \exp(iE_m t/\hbar) \hat{L} \psi_n(\mathbf{r}) \exp(-iE_n t/\hbar) dV \\ &= \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \hat{L} \exp[i(E_m - E_n)t/\hbar] \psi_n(\mathbf{r}) dV, \quad \text{tj.} \\ L_{mn}(t) &= \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \hat{L}_H(t) \psi_n(\mathbf{r}) dV. \end{aligned} \quad (7.96)$$

Naravno, matrični element se nije promijenio pri ovim manipulacijama. Jednačine (7.94) i (7.96) se razlikuju samo po tome da je u slučaju (7.94) vremenski zavisna talasna funkcija $\psi_n(\mathbf{r}, t)$, a u slučaju (7.96) operator $\hat{L}_H(t)$ je zavisан od vremena. Prema tome, operator u Heisenbergovoј reprezentaciji je

$$\hat{L} \rightarrow \hat{L}_H(t) = \hat{L} \exp[i(E_m - E_n)t/\hbar]. \quad (7.97)$$

Ovo vrijedi za operatore koji ne zavise eksplicitno od vremena. U opštem slučaju prelaz sa Heisenbergove na Schrödingerovu sliku opisujemo unitarnom transformacijom. Pomoću operatora

$$\hat{S} = \exp(-i\hat{H}t/\hbar) \quad (7.98)$$

dobijamo

$$\psi_H(\mathbf{r}) = \hat{S}^{-1} \psi_S(\mathbf{r}, t) \quad (7.99)$$

za talasnu funkciju, a

$$\hat{L}_H(t) = \hat{S}^{-1}(t) \hat{L} \hat{S}(t) \quad (7.100)$$

za operatore. Ovdje indeks H označava Heisenbergovu a indeks S Schrödingerovu sliku. Poređenje (7.96) i (7.97) pokazuje da je transformacija (7.100) ispravna u energetskoj reprezentaciji.

7.8 Reprezentacija međudjelovanja

Sistem čiji se hamiltonijan može razdvojiti na jedan osnovni dio \hat{H}_0 i na dodatnu interakciju \hat{V} :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (7.101)$$

može se opisati pomoću tzv. *reprezentacije (slike) međudjelovanja* koja se još naziva i *interakciona reprezentacija (slika)*. U toj slici i talasne funkcije i operatori su vremenski zavisni. Interakciona reprezentacija se dobija iz Schrödingerove pomoću unitarne transformacije

$$\hat{S}_I = \exp\left(-i\hat{H}_0 t/\hbar\right). \quad (7.102)$$

Ova jednačina je analogna (7.98). Kao i u (7.99) za talasnu funkciju dobijamo

$$\psi_I(\mathbf{r}, t) = \hat{S}_I^{-1}\psi_S(\mathbf{r}, t), \quad (7.103)$$

a operator u interakcionoj slici je dat sa

$$\hat{L}_I(t) = \hat{S}_I^{-1}(t) \hat{L}_S \hat{S}_I(t), \quad (7.104)$$

što je analogno relaciji (7.100).