

Univerzitet u Sarajevu  
Prirodno-matematički fakultet  
Odsjek za fiziku

# KVANTNA MEHANIKA II

## UDŽBENIK

2012.



# Sadržaj

<b>1</b>	<b>Aproksimativni metodi</b>	<b>1</b>
1.1	Stacionarna teorija perturbacije . . . . .	1
1.2	Degeneracija . . . . .	5
1.3	Ritzov varijacioni metod . . . . .	7
1.4	Kvaziklasična (WKB) aproksimacija . . . . .	9
1.4.1	Klasični limit . . . . .	9
1.4.2	Granični uslovi u prevojnoj tački . . . . .	14
1.4.3	Bohr-Sommerfeldovo pravilo kvantiziranja (vježbe) . . . . .	23
1.4.4	Prolaz kroz potencijalnu barijeru (vježbe) . . . . .	23
1.5	Zadaci sa pismenih ispita iz kvantne mehanike . . . . .	23
<b>2</b>	<b>Vremenski zavisna teorija perturbacije i poluklasična teorija zračenja</b>	<b>27</b>
2.1	Vremenski zavisna teorija perturbacije . . . . .	27
2.2	Vremenski nezavisna perturbacija . . . . .	32
2.3	Prelazi između kontinuiranih stanja . . . . .	34
2.4	Fermijevo zlatno pravilo . . . . .	40
2.5	Spontana i stimulisana emisija i apsorpcija . . . . .	40
2.6	Veza spontane i stimulisane emisije i apsorpcije – Einsteinov termodinamički pristup . . . . .	41
2.7	Izvođenje jednačine za vjerovatnoću apsorpcije . . . . .	42
2.8	Širina i forma spektralne linije . . . . .	47
2.9	Princip rada lasera . . . . .	51
2.10	Zadaci . . . . .	54
<b>3</b>	<b>Spin</b>	<b>57</b>
3.1	Stern-Gerlachov eksperiment . . . . .	57
3.2	Cijepanje spektralnih linija . . . . .	58
3.3	Einstein-de Haas eksperiment . . . . .	61
3.4	Matematički opis spina . . . . .	62
3.5	Talasnne funkcije sa spinom . . . . .	65

3.6	Interakcija sa elektromagnetnim poljem . . . . .	68
3.7	Paulijeva jednačina . . . . .	69
<b>4</b>	<b>Kvantna mehanika višestrukih sistema</b>	<b>73</b>
4.1	Uvod. Jednačina neprekidnosti . . . . .	73
4.2	Zakon očuvanja ukupnog impulsa sistema čestica . . . . .	77
4.3	Kretanje centra masa sistema čestica . . . . .	78
4.4	Zakon očuvanja ukupnog ugaonog momenta . . . . .	83
4.5	Male oscilacije višestrukih sistema . . . . .	91
<b>5</b>	<b>Identične čestice</b>	<b>93</b>
5.1	Uvod . . . . .	93
5.2	Paulijev princip . . . . .	95
5.3	Izmjenska degeneracija . . . . .	96
5.4	Slaterova determinanta . . . . .	97





# Poglavlje 1

## Aproksimativni metodi

Egzaktno rješenje Schrödingerove jednačine postoji samo za nekoliko jednostavnih problema. Zato se ona obično rješava primjenom aproksimativnih metoda. Teorija perturbacije se koristi u slučajevima kada se realni sistem može opisati pomoću male promjene lako rješljivih idealizovanih sistema. Hamiltonijan sistema je tada oblika:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon \hat{W}, \quad (1.1)$$

gdje se  $\hat{H}$  i  $\hat{H}_0$  ne razlikuju previše. Veličina  $\hat{H}_0$  se naziva *hamiltonijan neperturbovanog sistema*. Perturbacija  $\varepsilon \hat{W}$  (tj. prilagođenje realnom sistemu) mora biti vrlo mala, a tzv. *perturbacioni parametar*  $\varepsilon$  je realni parametar koji omogućava razvoj talasnih funkcija i energija u stepene redove po  $\varepsilon$ .

Primjenom ovoga metoda možemo opisati veliki broj problema sa kojima se srećemo u atomskoj fizici gdje jezgro obezbjeđuje jaki centralni potencijal za elektrone; preostale slabe interakcije su onda opisane kao perturbacija. Primjeri tih dodatnih interakcija su: magnetna interakcija (spin-orbitalna veza), elektrostatičko odbijanje elektrona i uticaj slabih vanjskih polja. Za početak ćemo se ograničiti na perturbaciju koja je konstantna u toku vremena i na hamiltonijan  $\hat{H}_0$  čiji spektar je diskretan i nedegenerisan.

### 1.1 Stacionarna teorija perturbacije

Pretpostavit ćemo da se hamiltonijan može napisati u obliku (1.1) i da su nam vlastite vrijednosti i vlastite funkcije neperturbovanog hamiltonijana  $\hat{H}_0$  poznate:

$$\hat{H}_0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0. \quad (1.2)$$

Tražimo vlastite vrijednosti i vlastite funkcije totalnog hamiltonijana  $\hat{H}$ , tj.

$$\hat{H} \Psi = E \Psi, \quad (1.3)$$

$$(\hat{H}_0 + \varepsilon \hat{W})\Psi = E\Psi. \quad (1.4)$$

Tražene egzaktne talasne funkcije  $\Psi$  se razvijaju po poznatim rješenjima  $\psi_n^0$  neperturbovanog sistema:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n a_n \psi_n^0(\mathbf{r}). \quad (1.5)$$

Uvrštavanjem ove relacije u (1.4) i koristeći (1.2) dobijamo

$$\sum_n a_n (E_n^0 - E + \varepsilon \hat{W})\psi_n^0 = 0. \quad (1.6)$$

Množenje sa  $\psi_m^{0*}$  i integriranje daje

$$\sum_n a_n [(E_n^0 - E)\delta_{mn} + \varepsilon W_{mn}] = 0. \quad (1.7)$$

Pri tome smo koristili činjenicu da su talasne funkcije ortonormirane

$$\int \psi_m^{0*} \psi_n^0 dV = \delta_{mn}. \quad (1.8)$$

Matrični element  $W_{mn}$  je dat sa

$$W_{mn} = \int \psi_m^{0*} \hat{W} \psi_n^0 dV. \quad (1.9)$$

Jednačina (1.7) se može transformisati u

$$a_m (E_m^0 - E + \varepsilon W_{mm}) + \varepsilon \sum_{n \neq m} a_n W_{mn} = 0. \quad (1.10)$$

Za  $\varepsilon = 0$  imamo samo jedno stanje sa  $a_m^{(0)} = 1$  i  $E^{(0)} = E_m^0$ , tako da je, prema (1.5),  $\Psi = \psi_m^0$ . Ako je  $\varepsilon \neq 0$  talasna funkcija će se promijeniti i pojaviti će se mješavina sa stanjima  $\psi_n^0$ ,  $n \neq m$ .

Sada ćemo iskoristiti činjenicu da je perturbacija mala i razvit ćemo i tražene koeficijente razvoja  $a_m$  i vlastite vrijednosti energije  $E$  u stepene redove po perturbacionom parametru  $\varepsilon$ :

$$a_m = a_m^{(0)} + \varepsilon a_m^{(1)} + \varepsilon^2 a_m^{(2)} + \dots, \quad (1.11)$$

$$E = E^{(0)} + \varepsilon E^{(1)} + \varepsilon^2 E^{(2)} + \dots. \quad (1.12)$$



Brojevi u zagradama u gornjem indeksu pokazuju nam stepen aproksimacije. Uvrštavanjem (1.11) i (1.12) u (1.10) i sređujući članove uz iste stepene  $\varepsilon$  dobijamo

$$\begin{aligned}
& (E_m^0 - E^{(0)}) a_m^{(0)} \\
& + \varepsilon \left[ (W_{mm} - E^{(1)}) a_m^{(0)} + (E_m^0 - E^{(0)}) a_m^{(1)} + \sum_{n \neq m} W_{mn} a_n^{(0)} \right] \\
& + \varepsilon^2 \left[ (W_{mm} - E^{(1)}) a_m^{(1)} + (E_m^0 - E^{(0)}) a_m^{(2)} + \sum_{n \neq m} W_{mn} a_n^{(1)} - E^{(2)} a_m^{(0)} \right] \\
& + \varepsilon^3 [\dots] + \dots = 0. \tag{1.13}
\end{aligned}$$

Koristeći ovu formulu možemo odrediti energiju i koeficijente razvoja u različitim stepenima aproksimacije. Sada ćemo to analizirati sistematski.

### Nulta aproksimacija

Za  $\varepsilon = 0$  nema perturbacije i (1.13) vodi na

$$(E_m^0 - E^{(0)}) a_m^{(0)} = 0, \quad m = 1, 2, 3, \dots \tag{1.14}$$

Fokusirat ćemo se na nivo  $m = k$  i analizirati promjenu njemu odgovarajuće energije i talasne funkcije. U tom slučaju, jednačina (1.14) daje

$$E^{(0)} = E_k^0, \quad a_m^{(0)} = \delta_{mk}. \tag{1.15}$$

### Prva aproksimacija

Uvrštavajući (1.14) u (1.13) i uzimajući u obzir samo članove do prvog reda po  $\varepsilon$ , dobijamo

$$(E_m^0 - E_k^0) \delta_{mk} + \varepsilon \left[ (W_{mm} - E^{(1)}) \delta_{mk} + (E_m^0 - E_k^0) a_m^{(1)} + \sum_{n \neq m} \delta_{nk} W_{mn} \right] = 0. \tag{1.16}$$

Prvi član je jednak nuli jer je on upravo rješenje u nultoj aproksimaciji. Za  $m = k$  dobijamo pomak energije  $k$ -tog nivoa u prvoj aproksimaciji:

$$E^{(1)} = W_{kk}. \tag{1.17}$$

Za koeficijente stanja sa  $m \neq k$  na osnovu (1.16) nalazimo

$$(E_m^0 - E_k^0) a_m^{(1)} + W_{mk} = 0 \quad \Rightarrow \quad a_m^{(1)} = \frac{W_{mk}}{E_k^0 - E_m^0}, \quad m \neq k. \tag{1.18}$$

Jednačina (1.16) nam očito ne daje uslov za koeficijent  $a_{m=k}^{(1)}$ . Taj koeficijent možemo odrediti iz uslova normiranja talasne funkcije  $\psi_k$ . Koristeći jednačinu (1.11), u prvom redu računa perturbacije dobijamo

$$\Psi = \sum_m a_m \psi_m^0 = \sum_m \left( \sum_{i=0,1} \varepsilon^i a_m^{(i)} \right) \psi_m^0 = \psi_k^0 + \varepsilon \left( a_k^{(1)} \psi_k^0 + \sum_{m \neq k} \frac{W_{mk}}{E_k^0 - E_m^0} \psi_m^0 \right), \quad (1.19)$$

tako da je:  $1 = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1 + \varepsilon (a_k^{(1)} + a_k^{(1)*}) + \varepsilon^2 |a_k^{(1)}|^2$ , pri čemu smo uzeli u obzir ortonormiranost stanja  $\psi_m^0$ . Zanimajući član proporcionalan sa  $\varepsilon^2$  dobijamo

$$0 = \varepsilon \left( a_k^{(1)} + a_k^{(1)*} \right). \quad (1.20)$$

Pošto su talasne funkcije određene samo do na fazni faktor, možemo izabrati da je  $a_k^{(1)}$  realno, tako da, na osnovu (1.20), kao rezultat dobijamo  $a_k^{(1)} = 0$ .

### Druga aproksimacija

Ako prvu aproksimaciju uvrstimo u (1.13) za  $m = k$ , tada je samo dio koeficijenata uz  $\varepsilon^2$  različit od nule, tako da za energiju dobijamo

$$E^{(2)} = \sum_{n \neq k} \frac{W_{kn} W_{nk}}{E_k^0 - E_n^0}. \quad (1.21)$$

Analogno, za koeficijente sa  $m \neq k$ , je

$$a_m^{(2)} = -\frac{W_{kk} W_{mk}}{(E_m^0 - E_k^0)^2} + \sum_{n \neq k} \frac{W_{mn} W_{nk}}{(E_k^0 - E_n^0)(E_k^0 - E_m^0)}, \quad m, n \neq k. \quad (1.22)$$

Da bismo odredili koeficijente  $a_k^{(2)}$  ponovo moramo koristiti uslov normiranja. Ova procedura se može nastaviti tako da se uticaj perturbacije odredi u proizvoljnom stepenu aproksimacije. Prema relaciji (1.12) za energiju  $k$ -tog stanja dobijamo

$$E_k = E_k^0 + \varepsilon W_{kk} - \varepsilon^2 \sum_{n \neq k} \frac{W_{kn} W_{nk}}{E_n^0 - E_k^0} + \dots \quad (1.23)$$

Ovo je interesantan rezultat. Prva korekcija na energiju neperturbovanog stanja  $E_k^0$  je očekivana vrijednost perturbacije, što se i moglo očekivati. Ako  $k$  označava osnovno stanje sistema, tada je  $E_k^0 < E_n^0$  i popravka na energiju u drugom redu perturbacije je uvijek negativna, bez obzira na znak perturbacije, zato što je

$$W_{nk} W_{kn} = |W_{kn}|^2 \quad \text{i} \quad E_n^0 - E_k^0 > 0. \quad (1.24)$$

Ova važna činjenica se koristi pri rješavanju mnogih problema, posebno u onim slučajevima kada je korekcija prvog reda  $W_{kk}$  iz nekog razloga jednaka nuli.

Pri primjeni teorije perturbacije pretpostavili smo da je perturbacija mala, tj. da se energetske nivoe i njihove razlike ne mijenjaju bitno. Ovo možemo izraziti na slijedeći način:

$$\left| \frac{\varepsilon W_{mn}}{E_m^0 - E_n^0} \right| \ll 1 \quad \text{za} \quad m \neq n. \quad (1.25)$$

Pošto su u slučaju Coulombove interakcije energije  $E_m^0$  i  $E_n^0$  vrlo bliske za velike vrijednosti kvantnih brojeva  $m$  i  $n$ , teorija perturbacije se može primijeniti samo za slučaj jako vezanih stanja. Pri izvođenju perturbacionih formula mi smo zahtjevali da se priroda spektra ne mijenja kvalitativno. Pri uključivanju perturbacije  $\hat{W}$  perturbovana stanja  $\Psi_k$  se trebaju pojaviti kontinuirano iz neperturbovanih stanja  $\psi_k^0$ .

## 1.2 Degeneracija

Sada ćemo ukratko razmotriti primjenu teorije perturbacije na spektar sa degenerisanim stanjima. Do sada smo pretpostavljali da za svaku energiju  $E_k^0$  postoji tačno određeno stanje  $\psi_k^0$ . Međutim, u slučaju degeneracije, za svaki dati energetske nivo  $E_n^0$  postoji niz vlastitih funkcija  $\psi_{n\beta}^0$ ,  $\beta = 1, 2, \dots, f_n$ . Ovdje indeks  $\beta$  označava jedan ili više kvantnih brojeva. Vlastite vrijednosti energije ne zavise od  $\beta$ . Takav nivo je  $f_n$ -struko degenerisan.

U slučaju degeneracije jednačinu (1.10) moramo prepisati u obliku

$$a_{m\alpha} (E_m^0 - E + \varepsilon W_{m\alpha m\alpha}) + \varepsilon \sum_{n\beta \neq m\alpha} a_{n\beta} W_{m\alpha n\beta} = 0, \quad (1.26)$$

gdje su matricni elementi dati sa

$$W_{m\alpha n\beta} = \int \psi_{m\alpha}^{0*} \hat{W} \psi_{n\beta}^0 dV. \quad (1.27)$$

Vlastite vrijednosti energije neperturbovanih stanja  $E_n^0$  nemaju dodatnih indeksa.

U nultoj aproksimaciji, za nivo  $m = k$  dobijamo

$$a_{k\alpha}^{(0)} (E_k^0 - E^{(0)}) = 0. \quad (1.28)$$

Očito je

$$E^{(0)} = E_k^0 \quad \text{i} \quad \begin{cases} a_{k\alpha}^{(0)} \neq 0 & \text{za} \quad \alpha = 1, \dots, f_k, \\ a_{m\alpha}^{(0)} = 0 & \text{za} \quad m \neq k \quad \text{i} \quad \alpha = 1, \dots, f_k. \end{cases} \quad (1.29)$$

Dvostruka suma po  $n$  i  $\beta$  se svodi na jednostruku sumu po  $\beta$  (zato što ostaje samo član  $n = k$ ) i za  $k$ -ti nivo u prvoj aproksimaciji dobijamo

$$(E_k^0 - E + \varepsilon W_{k\alpha k\alpha}) a_{k\alpha}^{(0)} + \varepsilon \sum_{\beta \neq \alpha}^{f_k} a_{k\beta}^{(0)} W_{k\alpha k\beta} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, f_k. \quad (1.30)$$

Jednačina (1.30) predstavlja sistem  $f_k$  linearnih jednačina za koeficijente  $a_{k\alpha}^{(0)}$ . Determinanta tog sistema ima dimenziju  $f_k$ . Netrivijalno (tj. različito od nule) rješenje za  $a_{k\alpha}^{(0)}$  se dobija ako je ta determinanta jednaka nuli:

$$D_k = \begin{vmatrix} E_k^0 + \varepsilon W_{k1k1} - E & \varepsilon W_{k1k2} & \cdots & \varepsilon W_{k1kf_k} \\ \varepsilon W_{k2k1} & E_k^0 + \varepsilon W_{k2k2} - E & \cdots & \varepsilon W_{k2kf_k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varepsilon W_{kf_kk1} & \varepsilon W_{kf_kk2} & \cdots & E_k^0 + \varepsilon W_{kf_kkf_k} - E \end{vmatrix} = 0. \quad (1.31)$$

Ovo je tzv. *sekularna jednačina*. To je jednačina  $f_k$ -tog stepena za određivanje energije  $E$ , koja, u opštem slučaju, ima  $f_k$  rješenja  $E_{k\alpha}$ . Pošto je perturbacija  $\varepsilon \bar{W}$  mala, ta rješenja su međusobno bliska. Degeneracija  $k$ -tog nivoa je uklonjena pod uticajem perturbacije. Stanje, koje je ranije bilo  $f_k$ -struko degenerisano, je pocijepano na  $f_k$  bliskih (po energijama) stanja sa energijama  $E_{k\alpha}$ ,  $\alpha = 1, \dots, f_k$ .

Treba naglasiti da je pojava degeneracije uvijek povezana sa simetrijom sistema. Npr.,  $(2l+1)$ -struka degeneracija ugaonog momenta stanja čestice u centralnom potencijalu je posljedica sferne simetrije potencijala (izotropnosti prostora). Ako je ta simetrija narušena pod uticajem perturbacije, degenerisani nivoi se cijepaju na niz međusobno susjednih nivoa. Uzrok može biti dodatna slaba interakcija [npr. spin-orbitalna (veza) sprega koja uzrokuje tzv. finu strukturu (cijepanje) nivoa] ili primjena slabog vanjskog polja.

Vlastite funkcije  $\Psi_{k\alpha}$  koje odgovaraju energijama  $E_{k\alpha}$  su posebne linearne kombinacije degenerisanih stanja  $\psi_{k\beta}^0$ . Odgovarajuće amplitude  $a_{k\alpha,\beta}^0$  se dobijaju uvrštavanjem rješenja  $E = E_{k\alpha}$  u relaciju (1.30), koja se zatim rješava po  $a_{k\beta}^{(0)} = a_{k\alpha,\beta}^0$ ,  $\beta = 1, \dots, f_k$ . Rezultujuće vlastite funkcije su onda oblika

$$\Psi_{k\alpha} = \sum_{\beta=1}^{f_k} a_{k\alpha,\beta}^0 \psi_{k\beta}^0. \quad (1.32)$$

Pošto sada ponovo imamo nedegenerisane nivoe, energije i funkcije stanja u višim redovima teorije perturbacije možemo naći kao u prethodnom odjeljku.

## 1.3 Ritzov varijacioni metod

Moguće je odrediti osnovno stanje sistema i bez eksplicitnog rješavanja Schrödingerove jednačine tako što se zahtjeva da mu je energija najniža od svih mogućih energija za sve moguće talasne funkcije. Da bismo to shvatili razmotrit ćemo proizvoljni hamiltonijan  $\hat{H}$  i nametnuti uslov da spektar koji odgovara tom hamiltonijanu ima donju granicu. To znači da on ima najnižu, nedegenerisanu vlastitu vrijednost energije:

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.33)$$

$$E_n > E_0, \quad n \neq 0. \quad (1.34)$$

Proizvoljnu normiranu talasnu funkciju  $\psi$  možemo razviti po vlastitim funkcijama hamiltonijana  $\hat{H}$ :

$$\psi = \sum_n a_n \psi_n, \quad \sum_n |a_n|^2 = 1. \quad (1.35)$$

Srednja vrijednost energije je

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle &= \sum_{nm} a_n^* \langle \psi_n | \hat{H} | \psi_m \rangle a_m = \sum_{nm} a_n^* a_m E_n \delta_{nm} \\ &= \sum_n E_n |a_n|^2 \geq E_0 \sum_n |a_n|^2 = E_0. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Ovo očito znači da svako stanje  $\psi$  koje se razlikuje od osnovnog stanja  $\psi_0$  ima veću vrijednost energije nego to stanje  $\psi_0$ . Ovaj rezultat se također može napisati u obliku

$$E_0 = \min_{\psi \in \mathcal{H}} \left[ \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \right]. \quad (1.37)$$

Ovdje  $\psi \in \mathcal{H}$  označava da je  $\psi$  element Hilbertovog prostora  $\mathcal{H}$ . Jednačina (1.37) je napisana u takvom obliku da funkcija  $\psi$  uopšte ne mora biti normirana. Prema tome, određivanje energije osnovnog stanja smo sveli na *varijacioni problem*. Iz varijacionog računa znamo da je neophodan uslov za ekstrem (minimum) da je prva varijacija od (1.37) jednaka nuli, tj.:

$$\delta(E_\psi) \equiv \delta \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = 0. \quad (1.38)$$

Odavde nalazimo da je

$$\frac{(\delta \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle) \langle \psi | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle (\delta \langle \psi | \psi \rangle)}{\langle \psi | \psi \rangle^2} = 0. \quad (1.39)$$

Dovoljno je da je brojnik u gornjem izrazu jednak nuli. Pošto je  $\psi$  kompleksna funkcija, možemo  $\psi$  i  $\psi^*$  posmatrati kao dvije nezavisne funkcije. Tada, koristeći relacije

$$\frac{\delta}{\delta\psi^*} \int dV \psi^* (\hat{H}\psi) = \hat{H}\psi, \quad (1.40)$$

$$\frac{\delta}{\delta\psi^*} \int dV \psi^* \psi = \psi, \quad (1.41)$$

na osnovu (1.39) dobijamo slijedeću jednačinu za vlastite vrijednosti za  $\psi$ :

$$\langle\psi|\psi\rangle\hat{H}\psi - \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle\psi = 0, \quad \text{tj.} \quad \hat{H}\psi = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\psi \equiv E_\psi\psi, \quad (1.42)$$

što je upravo Schrödingerova jednačina.

Varijacioni princip (1.38) je poznat kao *Ritzov varijacioni metod*. Kao što smo pokazali, on je ekvivalentan Schrödingerovom formalizmu kvantne mehanike (za stacionarna stanja). Uz dodatni uslov da  $E_\psi$  bude apsolutni minimum dobijamo relaciju (1.37), odnosno energiju osnovnog stanja.

Ritzov metod ima veliku praktičnu primjenu. Obično se postupa na slijedeći način. Izabere se probna (testna) talasna funkcija  $\psi(x; \alpha_1, \dots, \alpha_n)$  koja zavisi od realnih parametara  $\alpha_i$ . Zatim se, u skladu sa relacijom (1.38), traži minimum od  $E_\psi(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ :

$$\frac{\partial}{\partial\alpha_i} (E_\psi(\alpha_1, \dots, \alpha_n)) = 0. \quad (1.43)$$

Na taj način se dobija aproksimativni rezultat za gornju granicu energije osnovnog stanja.

Moguće je također koristiti Ritzov varijacioni metod da se nađe najniže energetska stanje za neki specijalni slučaj, npr. za stanje sa ugaonim momentom  $l = 0$ ,  $l = 1$ ,  $l = 2$ , itd. Pri tome i probne funkcije moraju biti izabrane na odgovarajući način – one moraju biti talasne funkcije sa istim ugaonim momentom.

Također je moguće odrediti prvo slijedeće stanje sa najnižom energijom. Pri tome se zahtjeva da je ono ortogonalno na stanje najniže energije. Moguć je i veliki broj različitih poopštenja.

## 1.4 Kvaziklasična (WKB) aproksimacija

Ponašanje objekata u mikrosvijetu se često samo neznatno razlikuje od klasičnog ponašanja. Primjer je kretanje elektrona u katodnoj cijevi. U takvim slučajevima, za rješavanje kvantno-mehaničkih problema je pogodan aproksimativni metod koji je poznat pod nazivom kvaziklasična ili semiklasična aproksimacija. Ta aproksimacija je također poznata i kao Wentzel-Kramers-Brillouin aproksimacija ili WKB metod, pri čemu skraćeniica WKB dolazi od početnih slova prezimena naučnika koji su je prvi uveli. Taj metod se bazira na razvoju talasne funkcije  $\psi$  u red po Planckovoj konstanti, pri čemu se zanemaruju članovi višeg reda po  $\hbar$ .

### 1.4.1 Klasični limit

Na isti način kao što možemo napisati kompleksni broj u obliku  $\rho e^{i\alpha}$  ( $\rho$  je modul, a  $\alpha$  faza ili argument toga broja) možemo predstaviti kvantno-mehaničku talasnu funkciju kao:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t; \hbar) \exp[i f(\mathbf{r}, t; \hbar)], \quad (1.44)$$

gdje smo uzeli u obzir da talasna funkcija može zavisiti od Planckove konstante  $\hbar$  tako što smo označili da realne funkcije  $\varphi$  i  $f$  zavisi od  $\hbar$  kao od parametra. Funkciju (1.44) možemo napisati i u obliku

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp\{i[f(\mathbf{r}, t; \hbar) - i \ln \varphi(\mathbf{r}, t; \hbar)]\}.$$

Konačno, označavajući talasnu funkciju u vitičastoj zagradi kao  $iS(\mathbf{r}, t; \hbar)/\hbar$ , dobijamo

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r}, t; \hbar)\right\}. \quad (1.45)$$

Pri razmatranju kvaziklasične aproksimacije uobičajeno je da se talasna funkcija predstavi u obliku (1.45). Mi ćemo ubuduće označavati funkciju  $S$  kao  $S(\mathbf{r}, t)$ , ispuštajući parametar  $\hbar$ .

Uvrštavajući funkciju (1.45) u vremenski zavisnu Schrödingerovu jednačinu  $i\hbar\partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi = (\hat{T} + \hat{U})\psi$ , dobijamo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \exp(iS/\hbar) + U \exp(iS/\hbar) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \exp(iS/\hbar).$$

Koristeći relaciju ( $k$  je konstanta):  $\nabla^2 e^{kf(\mathbf{r})} = \nabla(\nabla e^{kf}) = \nabla(e^{kf} k \nabla f) = e^{kf} [k^2(\nabla f)^2 + k \nabla^2 f]$ , i skraćujući zajednički faktor  $\exp(iS/\hbar)$ , dobijamo jednačinu za funkciju  $S(\mathbf{r}, t)$ :

$$\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S + U = -\frac{\partial S}{\partial t}. \quad (1.46)$$

U limesu kada  $\hbar \rightarrow 0$  jednačina (1.46) se svodi na

$$\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U = -\frac{\partial S}{\partial t},$$

što je poznata Hamilton-Jacobijeva jednačina iz klasične mehanike. Zato i kažemo da se u limesu  $\hbar \rightarrow 0$  kvantna mehanika svodi na klasičnu.

Nas interesuje kvaziklasični slučaj kada su kvantni efekti mali ali nisu jednaki nuli. Zato ćemo analizirati jednačinu (1.46). Da bismo pojednostavili naš zadatak, posmatrat ćemo samo stacionarna stanja. Pored toga, ograničit ćemo se na jednodimenzionalni slučaj. Vrijeme ulazi u talasnu funkciju stacionarnog stanja kao faktor  $\exp(-iEt/\hbar)$ . Prema tome, funkcija  $S(\mathbf{r}, t)$  u (1.45) ima slijedeći oblik za stacionarna stanja:

$$S(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}) - Et. \quad (1.47)$$

Zamjenom (1.47) u (1.46) dobijamo slijedeću jednačinu za funkciju  $S(\mathbf{r})$ :

$$\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S + U = E, \quad (1.48)$$

odnosno za jednodimenzionalni slučaj

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{dS}{dx}\right)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\frac{d^2S}{dx^2} + U = E. \quad (1.49)$$

U jednačini (1.49) i ubuduće  $S$  označava funkciju  $S(x)$ .

Potražimo rješenje jednačine (1.49) u obliku reda

$$S = S_0 + \frac{\hbar}{i}S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \dots, \quad (1.50)$$

gdje veličine  $S_0$ ,  $S_1$ ,  $S_2$  itd. ne sadrže više  $\hbar$ . Zamjenom (1.50) u (1.49) dobijamo

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m} \left[ \frac{dS_0}{dx} + \frac{\hbar}{i} \frac{dS_1}{dx} + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{dS_2}{dx} + \dots \right]^2 \\ & - \frac{i\hbar}{2m} \left[ \frac{d^2S_0}{dx^2} + \frac{\hbar}{i} \frac{d^2S_1}{dx^2} + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{d^2S_2}{dx^2} + \dots \right] + U = E, \end{aligned} \quad (1.51)$$

što se, ako pišemo samo članove nultog i prvog reda po  $\hbar/i$ , svodi na

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2 + \frac{1}{2m} 2 \frac{dS_0}{dx} \frac{\hbar}{i} \frac{dS_1}{dx} + \dots - \frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2S_0}{dx^2} - \dots + U = E.$$



Izjednačavajući koeficijente pri istim stepenima  $\hbar$ , dobijamo slijedeći niz jednačina:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \left( \frac{dS_0}{dx} \right)^2 + U &= E, \\ 2 \frac{dS_0}{dx} \frac{dS_1}{dx} + \frac{d^2 S_0}{dx^2} &= 0, \\ \dots\dots\dots & \end{aligned} \quad (1.52)$$

Prva jednačina je jednodimenzionalna Hamilton-Jacobijeva jednačina za akciju. Rješenje te jednačine po  $dS_0/dx$  je:

$$\frac{dS_0}{dx} = \pm \sqrt{2m[E - U(x)]} = \pm p(x), \quad (1.53)$$

gdje je

$$p(x) = \sqrt{2m[E - U(x)]}. \quad (1.54)$$

Ako je  $E > U$ , veličina  $p(x)$  je realna, a kada je  $E < U$  ona je imaginarna i u tom slučaju ćemo je označiti sa  $i|p(x)|$ . Integriranjem jednačine (1.53) dobijamo:

$$S_0(x) = \pm \int_{x_0}^x p(x') dx'. \quad (1.55)$$

Izbor donje granice integrala ćemo objasniti kasnije. Diferenciranjem (1.53) po  $x$ , nalazimo da je:

$$\frac{d^2 S_0}{dx^2} = \pm \frac{dp}{dx}. \quad (1.56)$$

Riješimo sada drugu od jednačina (1.52) po  $dS_1/dx$  i uvrstimo u dobijeni rezultat izvide  $S_0$  po  $x$  koji su dati relacijama (1.53) i (1.56). Dobijamo slijedeću diferencijalnu jednačinu:

$$\frac{dS_1}{dx} = -\frac{1}{2p} \frac{dp}{dx}. \quad (1.57)$$

Integriranjem (1.57) za funkciju  $S_1(x)$  dobijamo:

$$S_1(x) = -\frac{1}{2} \ln p + c_1, \quad (1.58)$$

gdje je  $c_1$  proizvoljna konstanta. Prema tome, sa tačnošću do članova reda  $\hbar/i$ , funkcija (1.50) je data sa:

$$S(x) = \pm \int_{x_0}^x p(x') dx' - \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \ln p + c, \quad (1.59)$$

gdje je  $c$  neka nova konstanta. Da bismo uzeli u obzir obadva predznaka u (1.59), napisat ćemo talasnu funkciju kao sumu dva člana:

$$\begin{aligned} \psi(x) = & A \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \int_{x_0}^x p(x') dx' - \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \ln p + c \right] \right\} \\ & + B \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ - \int_{x_0}^x p(x') dx' - \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \ln p + c \right] \right\}. \end{aligned}$$

Uvodeći notaciju  $C_1 = A \exp(ic/\hbar)$ ,  $C_2 = B \exp(ic/\hbar)$ , dobijamo slijedeće izraze za talasnu funkciju:

$$\begin{aligned} \psi(x) = & C_1 \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' \right\} \\ & + C_2 \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' \right\}, \quad (E > U) \quad (1.60) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi(x) = & C'_1 \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx' \right\} \\ & + C'_2 \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ - \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx' \right\}. \quad (E < U) \quad (1.61) \end{aligned}$$

Vrijednosti koeficijenata  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C'_1$  i  $C'_2$  zavise od izbora donje granice u gornjim integralima. Sama priroda talasne funkcije ne zavisi od tog izbora.

Dva dobijena rješenja se znatno međusobno razlikuju. Kada se čestica kreće u klasično dozvoljenom području ( $E > U$ , impuls je realan), talasna funkcija ima oscilujući karakter, a kada se kretanje ne može ostvariti sa stanovišta klasične mehanike ( $E < U$ , impuls je imaginaran), talasna funkcija je suma dvaju eksponenata.

U tački gdje je  $E = U$ , koja je poznata kao prevojna tačka (eng. turning point; tačka okreta, tačka infleksije), impuls iščezava ( $dS_0/dx = p = 0$ ) i izrazi (1.60) i (1.61) gube smisao. Prema tome, metod koji smo razvili se ne može primijeniti u blizini prevojnih tačaka. Poznavanje ponašanja talasne funkcije u blizini prevojnih tačaka nam je potrebno da bismo odredili koeficijente  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C'_1$  i  $C'_2$  u izrazima za talasnu funkciju, tj. da bismo povezali talasne funkcije u prevojnoj tački. Ovaj problem ćemo razmotriti u narednom odjeljku. Na osnovu navedenoga je očito da donja granica integrala u (1.60) i (1.61) mora biti tako izabrana da interval integriranja  $[x_0, x]$  ne sadrži prevojne tačke.

Faktor  $1/\sqrt{p} \propto 1/\sqrt{v}$  u izrazu za talasnu funkciju ima jednostavno značenje. Zahvaljujući tom faktoru vjerovatnoća da čestica bude u intervalu od  $x$  do  $x + dx$ ,  $|\psi(x)|^2 dx$ , je proporcionalna sa  $dx/v = dt$ , tj. intervalu vremena u toku kojega je “klasična” čestica unutar  $dx$ .

Nađimo sada uslove primjenljivosti kvaziklasične aproksimacije. Uloga kvantnih efekata se karakteriše relativnom veličinom člana  $-i\hbar\nabla^2 S/(2m)$  u jednačini (1.48) (kada je taj član jednak nuli dobijamo čisto klasičnu jednačinu). Prema tome, moramo zahtijevati da doprinos toga člana bude mnogo manji od doprinosa prvog člana u (1.48), tj. uslov kvaziklasičnosti glasi:

$$\hbar|\nabla^2 S| \ll (\nabla S)^2,$$

što se u jednodimenzionalnom slučaju svodi na

$$\hbar \left| \frac{d^2 S}{dx^2} \right| \ll \left( \frac{dS}{dx} \right)^2. \quad (1.62)$$

Izvod akcije po koordinati daje komponentu impulsa koji odgovara toj koordinati. Prema tome, (1.62) znači da treba da vrijedi slijedeća relacija:

$$\hbar \left| \frac{dp}{dx} \right| \ll p^2. \quad (1.63)$$

Na osnovu jednačine (1.54) je

$$\left| \frac{dp}{dx} \right| = \frac{m}{p} \left| \frac{dU}{dx} \right|.$$

Zamjenom ovoga izraza u (1.63) dobijamo slijedeći uslov za primjenu kvaziklasične aproksimacije

$$\hbar m \left| \frac{dU}{dx} \right| \ll p^3. \quad (1.64)$$

Dakle, kvaziklasična aproksimacija vrijedi za dovoljno brze čestice (velike vrijednosti impulsa  $p$ ) koje se kreću u polju koje se ne mijenja previše pri prelazu iz jedne tačke u drugu (male vrijednosti  $dU/dx$ ).

Uslov (1.63) se može izraziti preko de Broglieove talasne dužine koristeći relaciju  $\tilde{\lambda} = \lambda/(2\pi) = \hbar/p$ . Rezultat je:

$$\left| \frac{d\tilde{\lambda}}{dx} \right| = \frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| \ll 1, \quad (1.65)$$

odakle slijedi da je  $|\tilde{\lambda}(x + \Delta x) - \tilde{\lambda}(x)| \approx |d\tilde{\lambda}/dx| \Delta x \ll \Delta x$ . Lijeva strana zadnje nejednakosti predstavlja promjenu  $\tilde{\lambda}$  do koje dolazi dok čestica prelazi rastojanje  $\Delta x$ . Prema tome, uslov kvaziklasičnosti se može formulisati kao zahtjev da je promjena talasne dužine na rastojanju  $\Delta x = \tilde{\lambda}$  mnogo manja od same talasne dužine  $\tilde{\lambda}$ .

Na osnovu uslova (1.64) lako se može procijeniti rastojanje do prevojne tačke za koje se još može koristiti kvaziklasična aproksimacija. Neka je koordinata prevojne tačke  $a$ . U toj tački potencijalna energija je jednaka totalnoj energiji:  $U(a) = E$ . Razvijmo potencijalnu energiju u red u okolini tačke  $a$  i uzmimo u obzir samo prva dva člana

$$U(x) = U(a) + \frac{dU}{dx}(x - a) = E + \frac{dU}{dx}(x - a).$$

Uvrštavanjem ovoga razvoja u (1.54) dobijamo

$$p^2 = 2m \left| \frac{dU}{dx} \right| |x - a|.$$

Konačno, zamjenjujući  $|dU/dx|$  iz ove relacije u (1.64), nalazimo da je

$$|x - a| \gg \frac{\hbar}{2p(x)} = \frac{\lambda(x)}{2} = \frac{\lambda(x)}{4\pi}, \quad (1.66)$$

gdje je  $\lambda(x)$  de Broglieva talasna dužina čestice u tački  $x$ . Ova relacija određuje rastojanje  $|x - a|$  do prevojne tačke za koje još uvijek vrijedi kvaziklasična aproksimacija.

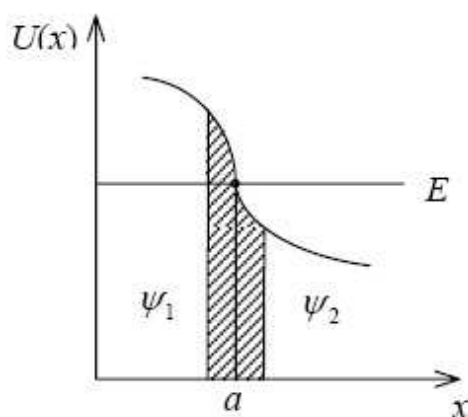
## 1.4.2 Granični uslovi u prevojnoj tački

Slika 1.1 pokazuje prevojnu tačku sa koordinatom  $x = a$ . Lijevo od označenog područja talasna funkcija je određena izrazom (1.61) i označena sa  $\psi_1$ , a desno od njege ona je određena sa (1.60) i označena sa  $\psi_2$ . Da bismo spojili te dvije funkcije u jednu jedinstvenu funkciju, tj. da bismo ostvarili vezu između koeficijenata  $C_1, C_2$  i  $C'_1, C'_2$ , moramo znati kako se talasna funkcija ponaša u označenoj oblasti. U toj oblasti se ne može koristiti kvaziklasična aproksimacija, što znači da moramo naći egzaktno rješenje Schrödingerove jednačine u toj oblasti. To rješenje ćemo iskoristiti da povežemo funkcije  $\psi_1$  i  $\psi_2$ . Taj zadatak nam olakšava činjenica da je veličina označene oblasti mala, tako da se može smatrati da se potencijalna energija u toj oblasti mijenja linearno sa promjenom  $x$ . Prema tome, možemo razviti  $U(x)$  u red, uzimajući u obzir samo članove nultog i prvog reda:

$$U(x) = U(a) + U'(a)(x - a). \quad (1.67)$$

Uzimajući u obzir da je  $U(a) = E$  i da je  $-U'(a)$  jednako sili  $F_x = F$  koja djeluje na česticu, možemo (1.67) prepisati kao

$$E - U(x) = (x - a)F. \quad (1.68)$$



Slika 1.1: Potencijal  $U(x)$  koji opada sa porastom  $x$  u okolini prevojne tačke  $x = a$ .

Zapazimo da je, prema slici 1.1, u okolini tačke  $x = a$  sila  $F > 0$ . Uvrštavanjem  $E - U(x)$  u Schrödingerovu jednačinu dobijamo

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mF}{\hbar^2}(x - a)\psi = 0. \quad (1.69)$$

Uvedimo novu varijablu  $\xi$  koja je sa  $x$  povezana relacijom

$$\beta\xi = x - a, \quad (1.70)$$

pri čemu konstantu  $\beta$  biramo tako da koeficijenti uz  $d^2\psi/d\xi^2$  i  $\xi\psi$  u dobijenoj jednačini postanu jednaki. Zamjenom (1.70) u (1.69) nalazimo da je

$$\frac{1}{\beta^2} \frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \frac{2mF}{\hbar^2} \beta\xi\psi = 0,$$

tako da moramo izabrati da je

$$\beta = \left( \frac{\hbar^2}{2mF} \right)^{1/3}. \quad (1.71)$$

Prije nego što nastavimo analizirati jednačinu (1.69) izvedimo dvije pomoćne relacije koje ćemo koristiti kasnije. U skladu sa relacijom (1.68) imamo

$$p(x) = \sqrt{2m[E - U(x)]} = \sqrt{2m(x - a)F} = \sqrt{2mF\beta\xi}, \quad (1.72)$$

odakle je

$$\xi = \frac{1}{2mF\beta} p^2(x) = \gamma p^2(x), \quad (1.73)$$

pri čemu je  $\gamma$  pozitivna konstanta. Dalje, uzimajući u obzir formulu (1.72), izračunat ćemo slijedeći integral:

$$\int_a^x p(x')dx' = \int_0^\xi p(\xi')\beta d\xi' = \sqrt{2mF\beta^3} \int_0^\xi \xi'^{1/2}d\xi' = \hbar \frac{2}{3}\xi^{3/2}.$$

Dakle, vrijedi

$$\frac{2}{3}\xi^{3/2} = \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x')dx'. \quad (1.74)$$

Vratimo se sada relaciji (1.69). Smjenom (1.70) i dijeljenjem dobijene relacije sa  $(2mF/\hbar^2)^{2/3}$  dobijamo diferencijalnu jednačinu

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \xi\psi = 0, \quad (1.75)$$

čije rješenje su Airyjeve funkcije  $\text{Ai}(\xi)$ . Prema tome, aproksimativno rješenje<sup>1</sup> Schrödingerove jednačine u okolini tačke  $x = a$  ima oblik

$$\psi(x) = C\text{Ai}(\xi(x)), \quad (1.76)$$

gdje je  $\xi(x)$  određeno relacijom (1.70), a  $C$  je koeficijent normiranja. Faktor  $\beta = [\hbar^2/(2mF)]^{1/3}$  je, u opštem slučaju, vrlo mali. Prema tome, kada vrijednost  $x - a$  odgovara granicama označene oblasti na slici 1.1 vrijednost varijable  $\xi$  će biti vrlo velika. Dakle, možemo koristiti asimptotsku formulu za Airyjeve funkcije čiji oblik zavisi od predznaka varijable  $\xi$ .

Lijevo od tačke  $x = a$  varijabla  $\xi$  je manja od nule i asimptotska formula ima oblik

$$\psi(x) = C \frac{\exp(-2|\xi|^{3/2}/3)}{2|\xi|^{1/4}}. \quad (x < a, \xi < 0) \quad (1.77)$$

Koristeći relaciju  $|z^s| = |[\rho \exp(i\alpha)]^s| = |\rho^s e^{i\alpha s}| = \rho^s = |z|^s$  dobijamo

$$\frac{2}{3}|\xi|^{3/2} = \frac{2}{3}|\xi^{3/2}| = \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x')dx' \right|. \quad (1.78)$$

Tada, uzimajući u obzir da je lijevo od tačke  $x = a$  impuls  $p(x) = i|p(x)|$ , kao i da je  $x < a$ , dobijamo

$$\frac{2}{3}|\xi|^{3/2} = \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x i|p(x')|dx' \right| = \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x |p(x')|dx' \right| = -\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')|dx'. \quad (1.79)$$

<sup>1</sup>Rješenje je aproksimativno u smislu da smo pretpostavili linearnu zavisnost  $U$  od  $x$ .

Uvrštavanjem  $|\xi|$  iz (1.73) u nazivnik i izraza (1.79) u eksponent u izrazu (1.77), nalazimo da je

$$\psi(x) = \frac{A}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'\right), \quad (x < a, E < U) \quad (1.80)$$

gdje je  $A = C/\gamma^{1/4}$ . Ova funkcija opada kada se udaljavamo ulijevo od tačke  $x = a$ .

Nadesno od tačke  $x = a$  varijabla  $\xi$  je veća od nule i asimptotska formula ima oblik

$$\psi(x) = C \frac{\sin(2\xi^{3/2}/3 + \pi/4)}{\xi^{1/4}}, \quad (x > a, \xi > 0) \quad (1.81)$$

Pošto izrazi (1.77) i (1.81) aproksimiraju istu funkciju konstanta  $C$  poprima istu vrijednost u obadva ta izraza. Koristeći (1.73) i (1.74) dobijamo

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right), \quad (x > a, E > U) \quad (1.82)$$

Sada možemo uskladiti koeficijente  $C_1, C_2, C'_1, C'_2$  koji se pojavljuju u kvaziklasičnim funkcijama (1.60) i (1.61). Na lijevoj granici označenog područja na slici 1.1 funkcije (1.61) i (1.80) se moraju podudariti. U tu svrhu moramo izabrati koordinatu prevojne tačke  $a$  kao  $x_0$ . Pored toga, da bi se (1.61) svelo na (1.80), moraju vrijediti uslovi

$$C'_1 = A/2, \quad C'_2 = 0. \quad (1.83)$$

Na desnoj strani označene oblasti funkcije (1.60) i (1.82) se moraju podudarati. Ako je  $x_0 = a$  to vrijedi ako je

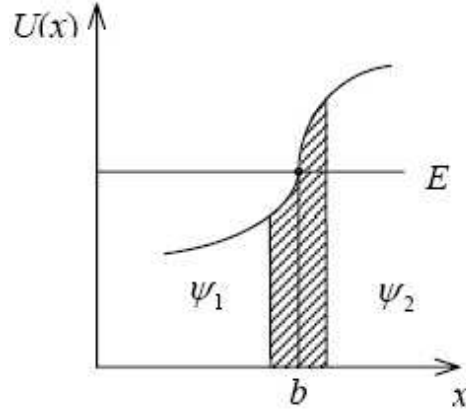
$$C_1 = \frac{A}{2i} e^{i\pi/4}, \quad C_2 = -\frac{A}{2i} e^{-i\pi/4}, \quad (1.84)$$

tako da se (1.60) svodi na (1.82). Formule (1.83) i (1.84) određuju granične uslove za prevojnu tačku tipa predstavljenog na slici 1.1. Prema tome, funkcije kvaziklasične aproksimacije u oblasti njihove primjenljivosti imaju oblik (1.80) lijevo od  $x = a$ , odnosno (1.82) desno od  $x = a$ .

Na analogan način se za prevojnu tačku tipa predstavljenog na slici 1.2 dobijaju slijedeće formule za funkcije u kvaziklasičnoj aproksimaciji:

$$\psi(x) = \frac{B}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p(x')| dx'\right), \quad (x > b, E < U) \quad (1.85)$$

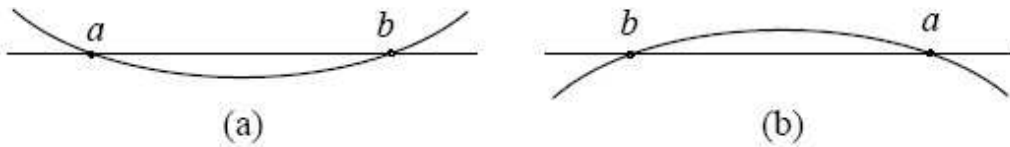
$$\psi(x) = \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(-\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right), \quad (x < b, E > U) \quad (1.86)$$



Slika 1.2: Potencijal  $U(x)$  koji raste sa porastom  $x$  u okolini prevojne tačke  $x = b$ .

Sumirajmo sada pravila povezivanja funkcija na granicama potencijalne jame [slika 1.3(a)] i potencijalne barijere [slika 1.3(b)]:

$$\begin{aligned} \text{lijevo od } a : \quad \psi(x) &= \frac{A}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'\right), \\ \text{desno od } a : \quad \psi(x) &= \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right); \end{aligned} \quad (1.87)$$



Slika 1.3: Potencijalna jama (a) i potencijalna barijera (b) sa po dvije prevojne tačke  $a$  i  $b$ .

$$\begin{aligned} \text{lijevo od } b : \quad \psi(x) &= \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(-\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right), \\ \text{desno od } b : \quad \psi(x) &= \frac{B}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p(x')| dx'\right). \end{aligned} \quad (1.88)$$

Moramo zapaziti da funkcija određena izrazom (1.87) sadrži samo jednu proizvoljnu konstantu  $A$ . Isto vrijedi i za funkciju određenu izrazom (1.88).



Prema tome, te funkcije ne mogu biti opšte rješenje diferencijalne jednačine drugog reda (u ovom slučaju – stacionarne Schrödingerove jednačine). Opšte rješenje se može dobiti kao suma dva linearno nezavisna rješenja. Metod povezivanja funkcija pomoću asimptotskih izraza za Airyjeve funkciju omogućio nam je da nađemo samo jedno takvo rješenje. Za nalaženje drugog rješenja koristi se drugačiji metod. Da bismo našli drugo rješenje potrebna nam je veza koju ćemo sada izvesti. Neka su  $\psi_1(x)$  i  $\psi_2(x)$  dva različita rješenja Schrödingerove jednačine. Ona zadovoljavaju jednačinu:  $-\hbar^2\psi''_{1,2}/(2m) + (U - E)\psi_{1,2} = 0$ , tj.  $\psi''_{1,2}/\psi_{1,2} = (2m/\hbar^2)(U - E)$ . Prema tome, možemo pisati:

$$\frac{1}{\psi_1} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} = \frac{1}{\psi_2} \frac{d^2\psi_2}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(U - E),$$

odakle slijedi da je

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} - \frac{\psi_2''}{\psi_2} = 0 \Rightarrow \psi_1''\psi_2 - \psi_1\psi_2'' = (\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2')' = 0.$$

Dakle, izveli smo traženu vezu funkcija  $\psi_1$  i  $\psi_2$ :

$$\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = \text{const.} \quad (1.89)$$

Izaberimo za funkciju  $\psi_1$  funkciju datu sa (1.87) i pokušajmo da konstruišemo funkciju  $\psi_2$  koja je linearno nezavisna od  $\psi_1$  i koja, zajedno sa  $\psi_2$ , zadovoljava relaciju (1.89). Tada možemo biti sigurni da je  $\psi_2$  rješenje Schrödingerove jednačine i možemo ga iskoristiti da dobijemo opšte rješenje. Pošto su funkcije  $e^x$  i  $e^{-x}$  linearno nezavisne, prirodno je da izaberemo slijedeću funkciju kao rješenje lijevo od  $a$  koje je nezavisno od (1.87):

$$\psi = \frac{A'}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'\right). \quad (x < a) \quad (1.90)$$

Na isti način, prirodno je da uzmemo slijedeću funkciju za izraz desno od  $a$ :

$$\psi = \frac{A''}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \alpha\right), \quad (x > a) \quad (1.91)$$

gdje je  $\alpha \neq -\pi/4$ . Provjermimo sada da funkcija (1.87) kao  $\psi_1$  i funkcija  $\psi_2$ ,

određena izrazima (1.90) i (1.91), zadovoljavaju relaciju (1.89). Dakle:

$$\begin{aligned} \text{lijevo od } a : & \frac{d}{dx} \left\{ \frac{A}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'\right) \right\} \frac{A'}{2\sqrt{|p(x)|}} \\ & \times \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'\right) - \frac{A}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'\right) \\ & \times \frac{d}{dx} \left\{ \frac{A'}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'\right) \right\} = \frac{AA'}{2\hbar}, \end{aligned} \quad (1.92)$$

$$\begin{aligned} \text{a desno od } a : & \frac{d}{dx} \left\{ \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \right\} \frac{A''}{\sqrt{p(x)}} \\ & \times \sin\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \alpha\right) - \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \\ & \times \frac{d}{dx} \left\{ \frac{A''}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \alpha\right) \right\} = \frac{AA''}{\hbar} \sin\left(\alpha + \frac{\pi}{4}\right). \end{aligned} \quad (1.93)$$

Prema tome, za razmatrane funkcije relacija (1.89) vrijedi i lijevo i desno od tačke  $x = a$ . Pošto razmatramo talasnu funkciju istog stanja i lijevo i desno od  $x = a$ , konstante (1.92) i (1.93) moraju biti identične. Dakle, slijedi da je:

$$\frac{A'}{2} = A'' \sin\left(\alpha + \frac{\pi}{4}\right).$$

Ovaj uslov se najlakše može zadovoljiti ako pretpostavimo da je

$$A'' = \frac{A'}{2} \quad \text{i} \quad \alpha = \frac{\pi}{4}. \quad (1.94)$$

Prema tome, rješenje koje je linearno nezavisno od (1.87) ima oblik:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{A'}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'\right), \quad (x < a) \\ \psi(x) &= \frac{A'}{2\sqrt{p(x)}} \sin\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right). \quad (x > a) \end{aligned} \quad (1.95)$$

Na analogan način dobijamo slijedeće formule za funkciju koja je linearno nezavisna od (1.88):

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{B'}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p(x')| dx'\right), \quad (x > b) \\ \psi(x) &= \frac{B'}{2\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right). \quad (x < b) \end{aligned} \quad (1.96)$$

Dakle, opšte rješenje Schrödingerove jednačine u kvaziklasičnoj aproksimaciji ima oblik:

$$\psi(x) = \frac{1}{2\sqrt{|p(x)|}} \left\{ A \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'\right) + A' \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'\right) \right\}, \quad (x < a) \quad (1.97)$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left\{ A \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) + \frac{A'}{2} \sin\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \right\}; \quad (x > a) \quad (1.98)$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left\{ B \sin\left(-\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) + \frac{B'}{2} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \right\}; \quad (x < b) \quad (1.99)$$

$$\psi(x) = \frac{1}{2\sqrt{|p(x)|}} \left\{ B \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p(x')| dx'\right) + B' \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p(x')| dx'\right) \right\}. \quad (x > b) \quad (1.100)$$

Funkcija (1.98), kao i funkcija (1.99), je superpozicija dva ravna talasa koji se kreću u suprotnim smjerovima. Ti talasi se, nakon što se sinusne funkcije izraze preko eksponencijalnih funkcija, mogu predstaviti u obliku

$$\psi(x) = \frac{C_1 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx'\right) + C_2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx'\right)}{\sqrt{p(x)}}, \quad (1.101)$$

gdje je

$$C_1 = \frac{2Ae^{i\pi/4} - A'e^{-i\pi/4}}{4i}, \quad C_2 = \frac{A'e^{i\pi/4} - 2Ae^{-i\pi/4}}{4i}. \quad (1.102)$$

Faktor uz  $C_1$  u (1.101) predstavlja talas koji se kreće nadesno duž  $x$ -ose (u pozitivnom smjeru), a faktor uz  $C_2$  predstavlja talas koji se kreće nalijevo duž

te ose (u negativnom smjeru). To se može lako shvatiti ako pretpostavimo da je  $p(x)$  konstantno. Tada faktor uz  $C_1$  postaje  $e^{ikx}$  ( $k = p/\hbar$ ), dok je faktor uz  $C_2$  jednak  $e^{-ikx}$ .

Lako se može provjeriti da je za

$$A' = -2iA \quad (1.103)$$

koeficijent  $C_2$  jednak nuli, dok je koeficijent  $C_1$  jednak  $Ae^{-i\pi/4}$ . U tom slučaju, kvaziklasična talasna funkcija desno od tačke  $x = a$  ima oblik

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - i\frac{\pi}{4}\right), \quad (1.104)$$

tj. predstavlja talas koji se prostire nadesno duž  $x$ -ose.

Zamjena vrijednosti (1.103) za  $A'$  u (1.97) vodi na slijedeći izraz za talasnu funkciju lijevo od tačke  $x = a$

$$\psi(x) = \frac{A}{2\sqrt{|p(x)|}} \left[ \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'\right) - 2i \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'\right) \right]. \quad (1.105)$$

Izražavajući sinusne funkcije preko eksponencijalnih funkcija u formuli (1.99), možemo prepisati talasnu funkciju lijevo od tačke  $x = b$  kao

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left\{ \frac{B'e^{i\pi/4} - 2Be^{-i\pi/4}}{4i} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x') dx'\right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{2Be^{i\pi/4} - B'e^{-i\pi/4}}{4i} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x') dx'\right) \right\} \\ &= \frac{1}{4\sqrt{p(x)}} \left\{ (2B - iB') \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + i\frac{\pi}{4}\right) \right. \\ &\quad \left. + (2B + iB') \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' - i\frac{\pi}{4}\right) \right\}. \quad (1.106) \end{aligned}$$

Prvi član u ovoj formuli odgovara talasu koji se prostire slijeva nadesno, dok drugi član odgovara prostiranju talasa zdesna nalijevo.

## 1.4.3 Bohr-Sommerfeldovo pravilo kvantiziranja (vježbe)

## 1.4.4 Prolaz kroz potencijalnu barijeru (vježbe)

## 1.5 Zadaci sa pismenih ispita iz kvantne mehanike

**Zadatak 8.1.1** Razmotriti harmonijski oscilator sa hamiltonijanom:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + W, \text{ gdje je } \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{C_0}{2} x^2, \text{ a } W = C_0 a x$$

potencijal perturbacije. Koristeći račun perturbacije izračunati vlastite vrijednosti energije i uporediti ih sa egzaktnim rezultatom. [Uputa: Koristiti rekurentnu relaciju:  $\xi \phi_n = \sqrt{\frac{n}{2}} \phi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \phi_{n+1}$ ,  $\xi = (mC_0/\hbar^2)^{1/4} x$ .]

**Zadatak 8.1.2** Energija interakcije dva atoma vodonika čije je međusobno rastojanje  $R$  u drugom redu računa perturbacije je:

$$W(R) = - \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n | \hat{H}' | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0}, \quad \hat{H}' \approx \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} (x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2),$$

gdje je  $\hat{H}'$  hamiltonijan interakcije. Pokazati da je:

$$W(R) \geq -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8e^2 a_0^5}{R^6}.$$

[Uputa: Talasna funkcija osnovnog stanja atoma vodonika je:

$\psi_{100}(\mathbf{r}) = a_0^{-3/2} \exp(-r/a_0)/\sqrt{\pi}$ . Koristiti formulu:  $\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = n!/a^{n+1}$ ,  $a > 0$ ,  $n > -1$ .]

**Zadatak 8.2.1** Koristeći Ritzov varijacioni metod za jednodimenzionalni harmonijski oscilator sa potencijalom  $V(x) = m\omega^2 x^2/2$  i probnu funkciju  $\psi_\alpha(x) = 1/(x^2 + \alpha)$ , odrediti parametar  $\alpha > 0$  tako da  $E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$  bude minimalno. Uporediti tako dobijenu vrijednost  $E_{\min}$  sa energijom osnovnog stanja harmonijskog oscilatora. [Uputa: koristiti tablični integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^{2m} dx}{(x^2 + \alpha)^n} = \frac{\pi(2m-1)!!(2n-2m-3)!!}{(2n-2)!!\alpha^{n-m-\frac{1}{2}}},$$

$\alpha > 0$ ,  $(2n+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n+1)$ ,  $(2n)!! = 2 \cdot 4 \cdots (2n)$ .]

**Zadatak 8.2.2** Koristeći varijacioni metod naći talasnu funkciju i energiju prvog pobuđenog stanja linearnog harmonijskog oscilatora sa potencijalom  $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ . Kao probnu funkciju koristiti funkciju:  $\psi_1(x) = Cx \exp(-Dx^2)$ ,  $D > 0$ ,  $C$  – konstanta normiranja. [Uputa: Koristiti tablične integrale ( $a > 0$ ):  $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\pi/a}$ ,  $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-ax^2) dx = -\frac{\partial}{\partial a} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \frac{1}{2} \sqrt{\pi/a^3}$ , itd.]

**Zadatak 8.2.3** Razmotriti česticu pod djelovanjem jednodimenzionalnog potencijala  $V(x) = \lambda x^4$ . Koristeći varijacioni metod sa probnom funkcijom  $\psi(x) = (2\alpha/\pi)^{1/4} \exp(-\alpha x^2)$  naći približnu vrijednost energije osnovnog stanja i uporediti je sa egzaktnom vrijednošću  $E_0 = 1,06\hbar^2 k^{1/3}/(2m)$ , gdje je  $k = 2m\lambda/\hbar^2$ . [Uputa: Koristiti tablične integrale ( $a > 0$ ):  $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\pi/a}$ ,  $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-ax^2) dx = -\frac{\partial}{\partial a} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \frac{1}{2} \sqrt{\pi/a^3}$ , itd.]

**Zadatak 8.2.4** Naći vrijednost parametra  $\lambda$  u probnoj funkciji  $\psi(x) = A \exp(-\lambda^2 x^2)$  koja vodi na najbolju aproksimaciju za energiju osnovnog stanja jednočestičnog hamiltonijana:  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + bx^4$ .  $A$  je konstanta normiranja. [Uputa: Koristiti tablične integrale ( $a > 0$ ):  $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\pi/a}$ ,  $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-ax^2) dx = -\frac{\partial}{\partial a} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \frac{1}{2} \sqrt{\pi/a^3}$ ,  $\int_{-\infty}^{\infty} x^4 \exp(-ax^2) dx = \frac{3}{4} \sqrt{\pi/a^5}$ .]

**Zadatak 8.2.5** Koristeći varijacioni metod, naći talasnu funkciju i energiju drugog pobuđenog stanja linearnog harmonijskog oscilatora sa potencijalom  $V(x) = \frac{m}{2} \omega^2 x^2$ . Kao probnu funkciju koristiti  $\psi_2(x, \alpha, \beta) = C(\beta x^2 - 1)e^{-\alpha x^2}$ . [Uputa: Naći konstantu normiranja  $C$ . Problem se svodi na minimizaciju  $E_2(\alpha, \beta)$  i može se pojednostaviti koristeći ortogonalnost funkcije  $\psi_2$  i talasne funkcije osnovnog stanja harmonijskog oscilatora:  $\psi_0(x) = (\lambda/\pi)^{1/4} e^{-\lambda x^2/2}$ ,  $\lambda = m\omega/\hbar$ . Koristiti tablični integral:  $\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = (2a)^{-n} \sqrt{\pi/a} \times 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n-1)$ .]

**Zadatak 8.2.6** Koristeći varijacioni metod procijeniti energiju osnovnog stanja čestice pod djelovanjem jednodimenzionalnog potencijala  $V(x) = g|x|$ . Koristiti probnu funkciju  $\psi(x) = c \theta(x+a) \theta(a-x) \left(1 - \frac{|x|}{a}\right)$ . Parametri  $c$  i  $a$  su promjenljivi, a  $\theta(x) = 0$  za  $x < 0$ ,  $\theta(x) = 1$  za  $x > 0$ . [Uputa: Parametar  $c$  odrediti iz uslova normiranja. Koristiti vezu  $d\theta(x)/dx = \delta(x)$ .]

**Zadatak 8.2.7** Primjenom varijacionog metoda naći približnu vrijednost energije osnovnog stanja čestice u Coulombovom polju  $V(r) = -V_0/r$ , koristeći probne funkcije oblika: a)  $\psi_\alpha(r) = C e^{-\alpha^2 r^2}$ , b)  $\psi_\alpha(r) = \begin{cases} C(a-r) & \text{za } r < a \\ 0 & \text{za } r > a \end{cases}$ ,

gdje su  $\alpha$  i  $a$  varijacioni parametri. Uporediti tako dobijene rezultate sa stvarnom vrijednošću energije osnovnog stanja.

[Uputa: za zadatak pod a) koristiti formule:

$$\int_0^\infty x^{2k} e^{-a^2 x^2} dx = \frac{1 \cdot 3 \cdots (2k-1) \sqrt{\pi}}{2^{k+1} a^{2k+1}}, \quad \int_0^\infty x^{2k+1} e^{-a^2 x^2} dx = \frac{k!}{2a^{2k+2}}.]$$

**Zadatak 8.2.8** Čestica mase  $m$  se kreće pod djelovanjem trodimenzionalnog privlačnog potencijala  $V(r) = -g^2/r^{3/2}$ . Koristeći varijacioni metod sa probnom funkcijom  $\psi = (\frac{k^3}{8\pi})^{1/2} e^{-kr/2}$  (vodonikov atom) naći gornju granicu za energiju  $s$  stanja ( $l = 0$ ). [Uputa: koristiti relaciju  $\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r})$  i tablične integrale:  $\int_0^\infty e^{-kr} r^{1/2} dr = \frac{1}{2k} \sqrt{\frac{\pi}{k}}$ ,  $\int_0^\infty e^{-kr} r dr = k^{-2}$ ,  $\int_0^\infty e^{-kr} r^2 dr = 2k^{-3}$ .]

**Zadatak 8.2.9** Koristeći varijacioni metod procijeniti energiju osnovnog stanja vodonikovog atoma. Koristiti probnu funkciju  $\psi(r, \theta, \phi) = \exp(-r/\alpha)$ . [Uputa: Koristiti tablični integral:  $\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = n!/a^{n+1}$ ,  $a > 0$ ,  $n > -1$ .]





## Poglavlje 2

# Vremenski zavisna teorija perturbacije i poluklasična teorija zračenja

### 2.1 Vremenski zavisna teorija perturbacije

Jedan od glavnih ciljeva kvantne mehanike je proračun vjerovatnoća prelaza iz nekog stanja  $\psi_n$  u neko drugo stanje  $\psi_m$ . Do toga prelaza dolazi pod uticajem vremenski zavisne perturbacije  $V(\mathbf{r}, t)$  koja, takoreći, “protrese” sistem i tako uzrokuje prelaz. Pitanje prelaza sistema iz jednog stanja u drugo ima smisla samo ako uzrok prelaza, tj. perturbacija  $V(\mathbf{r}, t)$ , djeluje samo u konačnom vremenskom intervalu, npr. od trenutka  $t = 0$  do trenutka  $t = T$ . Osim u toku tog vremenskog intervala, ukupna energija je konstanta kretanja i može se mjeriti.



Slika 2.1: Opšti oblik perturbacija u toku vremenskog intervala  $[0, T]$ . Takva perturbacija može npr. biti uzrokovana vanjskim električnim poljem koje se uključi u toku tog intervala.

Promjena talasne funkcije u toku djelovanja perturbacije  $V(\mathbf{r}, t)$  je data Schrödingerovom jednačinom. Međutim, kao što znamo, tu jednačinu je teško riješiti. Neka opšta predviđanja se mogu dati samo u slučaju ako je prelaz uzrokovan slabim vanjskim uticajem, odnosno ako je uticaj potencijala  $V(\mathbf{r}, t)$  slab. Takav uticaj se može interpretirati kao perturbacija.

Schrödingerova jednačina sa perturbacijom ima oblik:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_0(\mathbf{r})\psi + \hat{V}(\mathbf{r}, t)\psi. \quad (2.1)$$

Tu je  $\hat{H}_0(\mathbf{r})$  operator ukupne energije sistema bez perturbacije: index 0 označava vremensku nezavisnost.  $V(\mathbf{r}, t)$  je potencijal perturbacije ili, kratko, perturbacija.

Za proračun vjerovatnoće prelaza  $W_{mn}(t)$  sa energetskog nivoa  $E_n$  na nivo  $E_m$ , gdje su  $E_n$  i  $E_m$  energije neperturbovanog sistema opisanog hamiltonijanom  $\hat{H}_0(\mathbf{r})$ , pogodno je koristiti energetsku reprezentaciju. Potražimo prvo vlastite vrijednosti energije neperturbovanog problema, tj. rješenja jednačine:

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = \hat{H}_0(\mathbf{r})\tilde{\psi}. \quad (2.2)$$

Ako stacionarni dio normirane talasne funkcije zadovoljava jednačinu

$$\hat{H}_0(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r}) = E_k\psi_k(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

tada su vremenski zavisne funkcije

$$\tilde{\psi}_k(\mathbf{r}, t) = \psi_k(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_k t\right) \quad (2.4)$$

rješenja koja odgovaraju neperturbovanom sistemu. One čine kompletan skup funkcija, tako da se rješenje našeg problema (2.1) može razviti po tim funkcijama:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k a_k(t)\psi_k(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_k t\right) = \sum_k a_k(t)\tilde{\psi}_k(\mathbf{r}, t). \quad (2.5)$$

Uvrštavanjem (2.5) u (2.1) dobijamo

$$i\hbar \sum_k \frac{da_k}{dt} \tilde{\psi}_k + \sum_k a_k i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}_k}{\partial t} = \sum_k a_k \hat{H}_0(\mathbf{r})\tilde{\psi}_k + \sum_k a_k \hat{V}\tilde{\psi}_k, \quad (2.6)$$

što, na osnovu relacije  $i\hbar \partial \tilde{\psi}_k / \partial t = \hat{H}_0 \tilde{\psi}_k$ , daje

$$i\hbar \sum_k \frac{da_k(t)}{dt} \tilde{\psi}_k(\mathbf{r}, t) = \sum_k a_k(t) \hat{V}(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}_k(\mathbf{r}, t). \quad (2.7)$$

Množenjem slijeva sa  $\tilde{\psi}_m^*(\mathbf{r}, t)$  dobijamo

$$i\hbar \sum_k \frac{da_k}{dt} \psi_m^* \psi_k \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E_k - E_m) t \right] = \sum_k a_k \psi_m^* \hat{V} \psi_k \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E_k - E_m) t \right]. \quad (2.8)$$

Uzimajući u obzir ortonormiranost talasnih funkcija  $\psi_k$  i uvodeći skraćene oznake:

$$V_{mk}(t) \equiv \int d\mathbf{r} \psi_m^*(\mathbf{r}) \hat{V}(\mathbf{r}, t) \psi_k(\mathbf{r}), \quad \omega_{km} \equiv (E_k - E_m)/\hbar, \quad (2.9)$$

nakon integriranja (2.8) po  $d\mathbf{r}$ , dobijamo:

$$i\hbar \sum_k \frac{da_k}{dt} \delta_{mk} e^{i\omega_{mk}t} = \sum_k a_k(t) V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t}. \quad (2.10)$$

Pošto je  $\omega_{mm} = 0$ , konačno nalazimo da vrijedi relacija:

$$i\hbar \frac{da_m(t)}{dt} = \sum_k a_k(t) V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t}. \quad (2.11)$$

Frekvencije  $\omega_{mk}$  se ponekad nazivaju Bohrove frekvencije za prelaz  $m \rightarrow k$ , odnosno  $E_m \rightarrow E_k$ .

Pretpostavit ćemo da je u početku, tj. prije uključivanja perturbacije, sistem u stanju  $E_n$ . Prema tome, za  $t = 0$  je:

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \sum_k a_k(0) \tilde{\psi}_k(\mathbf{r}, 0) \doteq \tilde{\psi}_n(\mathbf{r}, 0) = \psi_n(\mathbf{r}). \quad (2.12)$$

To znači da je:

$$a_n(0) = 1 \quad \text{i} \quad a_k(0) = 0 \quad \text{za} \quad k \neq n, \quad (2.13)$$

pri čemu su koeficijenti  $a_k$  amplitude vjerovatnoće da se sistem nađe u stanju  $\psi_k$ . Funkcija  $\psi(\mathbf{r}, t)$  je normirana na jedinicu, tj.:

$$\begin{aligned} 1 &= \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \sum_{k,k'} a_k^*(t) a_{k'}(t) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E_{k'} - E_k) t \right] \int d\mathbf{r} \psi_k^*(\mathbf{r}) \psi_{k'}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{k,k'} a_k^*(t) a_{k'}(t) e^{i\omega_{kk'}t} \delta_{kk'} = \sum_k |a_k(t)|^2, \end{aligned}$$

tako da je

$$\sum_k |a_k(t)|^2 = 1. \quad (2.14)$$

Koeficijenti razvoja  $a_k(t)$  moraju zadovoljavati uslov normiranja u svakom trenutku  $t$ , uključujući i interval djelovanja perturbacije ( $0 \leq t \leq T$ ).

Prodiskutujemo sada fizikalno značenje koeficijenata  $a_k(t)$ . U trenutku  $t$  talasnu funkciju  $\psi(\mathbf{r}, t)$  možemo napisati kao

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k a_k(t) \psi_k(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_k t\right). \quad (2.15)$$

Matrični element

$$\langle \psi_m | \psi(t) \rangle = \langle \psi_m | \sum_k a_k(t) |\psi_k\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_k t\right) = a_m(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_m t\right) \quad (2.16)$$

opisuje “preklapanje” vremenski zavisne talasne funkcije  $\psi(\mathbf{r}, t)$  i stacionarne talasne funkcije  $\psi_m(\mathbf{r})$ . Vjerovatnoća nalaženja stanja  $\psi_m(\mathbf{r})$  u stanju  $\psi(\mathbf{r}, t)$  u trenutku  $t$  sa energijom  $E_m$  je data sa:

$$|\langle \psi_m | \psi(t) \rangle|^2 = |a_m(t)|^2. \quad (2.17)$$

Prema početnom uslovu je  $a_m(t=0) = \delta_{mn}$ . U opštem slučaju, za  $t > 0$ , je  $a_k(t) \neq 0, \forall k$ , tako da je očito da veličine  $|a_k(t)|^2$  predstavljaju vjerovatnoću da se sistem u trenutku  $t$  nađe u stanju  $\psi_k$  sa energijom  $E_k$ . Uzimajući u obzir početni uslov,  $|a_m(t)|^2$  je vjerovatnoća da se sistem, koji je u trenutku  $t=0$  bio u stanju  $\psi_n$ , u trenutku  $t$  nađe u stanju  $\psi_m$ . To je vjerovatnoća prelaza  $n \rightarrow m$ :

$$W_{mn}(t) = |a_m(t)|^2. \quad (2.18)$$

*Naš zadatak je da izračunamo amplitude  $a_m(t)$  rješavajući sistem spregnutih diferencijalnih jednačina (2.11) uz početni uslov (2.13).* Do sada je ovaj problem jasno i egzaktno formulisano. Međutim, u opštem slučaju, može se naći samo njegovo aproksimativno rješenje i to metodom sukcesivnih aproksimacija. Uzet ćemo u obzir činjenicu da je  $\hat{V}(\mathbf{r}, t)$  mala perturbacija. U odsustvu te perturbacije sistem ostaje nepromijenjen u svom početnom stanju. Prema tome, u *nultom redu* možemo uvesti sljedeću aproksimaciju:

$$a_k^{(0)}(t) = \delta_{nk}, \quad (2.19)$$

što znači da je rješenje nultog reda upravo dato početnim uslovom (2.13). Ova aproksimacija se koristi da se izračuna prva sljedeća najbolja aproksimacija tako što se uvrsti to rješenje u desnu stranu jednačine (2.11) (ovo je tzv. metod *sukcesivnih aproksimacija*):

$$i\hbar \frac{da_m^{(1)}(t)}{dt} = \sum_k a_k^{(0)}(t) V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t} = V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t}. \quad (2.20)$$

Ova procedura se može nastaviti dok se ne postigne željena tačnost. U opštem slučaju, iteraciona procedura za diferencijalnu jednačinu (2.11) se može formulisati kao:

$$i\hbar \frac{da_m^{(i+1)}(t)}{dt} = \sum_k a_k^{(i)}(t) V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t}. \quad (2.21)$$

Ograničit ćemo se na *aproksimaciju prvog reda*, u kojoj, nakon integriranja jednačine (2.20) po vremenu, dobijamo:

$$a_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{mn}(\tau) e^{i\omega_{mn}\tau} d\tau + \delta_{mn}. \quad (2.22)$$

Koristeći to što je  $V(\mathbf{r}, t) = 0$  za  $t < 0$  i  $t > T$ , i pretpostavljajući da je perturbacija tako mala da je aproksimacija prvog reda ispravna i za  $t = T$ , nalazimo da za  $t \geq T$  vrijedi:

$$a_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^T V_{mn}(\tau) e^{i\omega_{mn}\tau} d\tau = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} V_{mn}(\tau) e^{i\omega_{mn}\tau} d\tau, \quad m \neq n. \quad (2.23)$$

Ovo znači da je, za  $t > T$ ,  $a_m^{(1)}(t)$  konstantno u toku vremena, tj. postaje konstanta kretanja. Za  $t > T$  perturbacija je nestala i sistem se nalazi u novom stanju  $m$ .

Analizirajmo sada detaljnije značenje koeficijenata  $a_m^{(1)}(t)$ . Perturbacija se može razviti u Fourierov red:

$$V(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} V(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (2.24)$$

gdje su Fourierove komponente

$$V(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} V(\mathbf{r}, t) e^{i\omega t} dt. \quad (2.25)$$

Matrični element (2.9) se može prepisati kao

$$\begin{aligned} V_{mn}(t) &= \int d\mathbf{r} \psi_m^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}, t) \psi_n(\mathbf{r}) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} d\omega \int d\mathbf{r} \psi_m^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}, \omega) \psi_n(\mathbf{r}) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} V_{mn}(\omega) d\omega, \end{aligned} \quad (2.26)$$

gdje je  $V_{mn}(\omega)$  matrični element Fourierove komponente  $V(\mathbf{r}, \omega)$ :

$$V_{mn}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} V_{mn}(t) e^{i\omega t} dt. \quad (2.27)$$

Poređenjem ovoga rezultata sa izrazom za  $a_m^{(1)}(t)$ , (2.23), dobijamo relaciju:

$$a_m^{(1)}(t) = \frac{2\pi}{i\hbar} V_{mn}(\omega_{mn}), \quad (2.28)$$

tako da je tražena vjerovatnoća prelaza data sa:

$$W_{mn}(t) = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |V_{mn}(\omega_{mn})|^2, \quad t \geq T. \quad (2.29)$$

Prema tome, za  $t \geq T$ , vjerovatnoća prelaza  $W_{mn}$  je konstantna i različita od nule samo kad je  $V_{mn}(\omega_{mn}) \neq 0$ . To znači da je prelaz iz stanja  $\psi_n$  (sa nivoa  $E_n$ ) u stanje  $\psi_m$  (na nivo  $E_m$ ) moguć samo ako je frekvencija  $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$  sadržana u Fourierovom spektru  $V_{mn}(\omega_{mn})$  perturbacije. Prema tome, prelaz pokazuje rezonantno ponašanje.

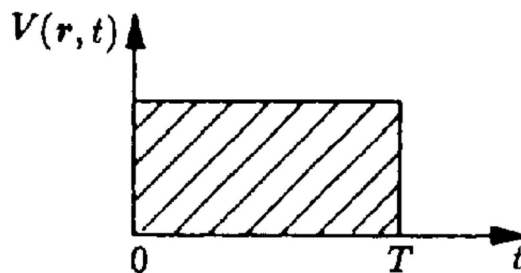
Očito, imamo istu situaciju kao sa sistemom oscilatora sa vlastitim frekvencijama koje su jednake Bohrovim frekvencijama  $\omega_{mn}$ . Ako se pojavi vanjska perturbacija koja se mijenja u toku vremena tada su stimulisani samo oni oscilatori koji imaju vlastitu frekvenciju koja je sadržana u Fourierovom spektru perturbacije.

## 2.2 Vremenski nezavisna perturbacija

Ako je

$$V(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} V(\mathbf{r}) & \text{za } 0 \leq t \leq T, \\ 0 & \text{inače,} \end{cases} \quad (2.30)$$

tj. ako perturbacija ne zavisi od vremena u toku svoga djelovanja u vremenskom intervalu  $t \in [0, T]$  (vidjeti sliku 2.2), tada se integral u (2.22) može lako izračunati i vrijedi:

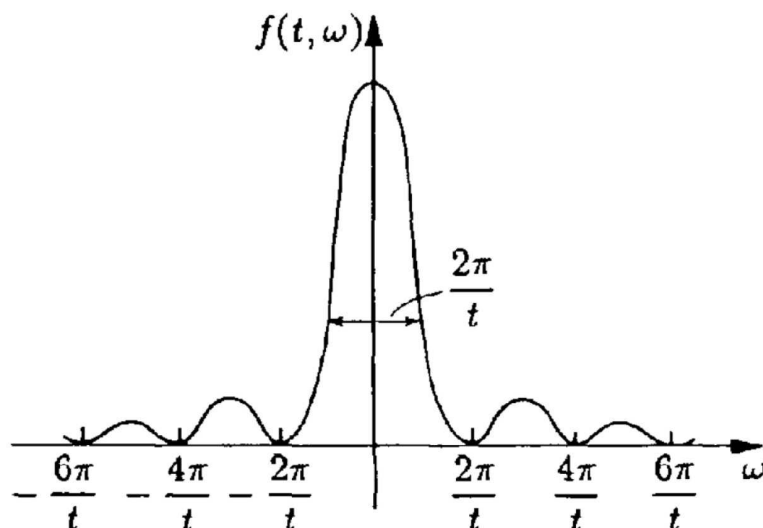


Slika 2.2: Perturbacija konstantna u toku vremenskog intervala  $[0, T]$ .

$$W_{mn}(t) = |a_m^{(1)}(t)|^2 = \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{mn}\tau} d\tau \right|^2 = \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2} f(t, \omega_{mn}), \quad (2.31)$$

gdje je

$$f(t, \omega) = \frac{1}{\omega^2} |e^{i\omega t} - 1|^2 = \frac{4}{\omega^2} \sin^2(\omega t/2) = \frac{2}{\omega^2} (1 - \cos \omega t). \quad (2.32)$$



Slika 2.3: Funkcija  $f(t, \omega)$  koja ima maksimum u  $\omega = 0$  i koja za  $t \rightarrow \infty$  teži  $2\pi t \delta(\omega)$ .

Funkcija  $f(t, \omega)$  je prikazana na slici 2.3 kao funkcija  $\omega$ . Ona ima dobro definisani maksimum za  $\omega = 0$ , širine  $2\pi/t$ , koji postaje izrazitiji i oštiji sa porastom  $t$ .

Na vježbama će biti pokazano da vrijede slijedeće relacije:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t, \omega) d\omega = 2\pi t, \quad (2.33)$$

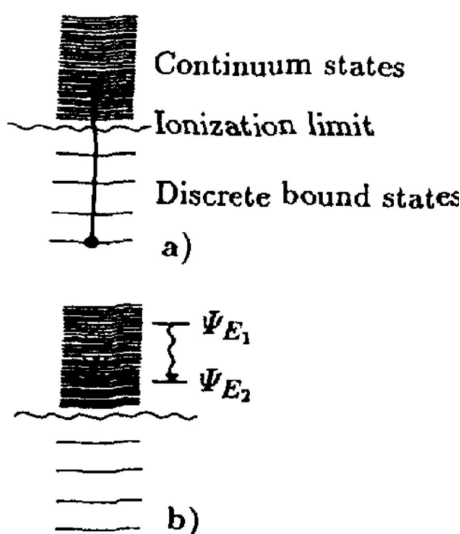
$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t, \omega) = 2\pi t \delta(\omega). \quad (2.34)$$

Za fiksnu vrijednost  $t$  vjerovatnoća  $W_{mn}$  u (2.31) zavisi na jednostavan način od konačnog stanja  $m$ . Ona je, do na konstantu, jednaka kvadratu matričnog elementa perturbacije  $|V_{mn}|^2$  pomnoženog faktorom  $f(t, \omega_{mn})$  koji zavisi od Bohrove frekvencije  $\omega_{mn}$  toga prelaza. Pošto težinski faktor  $f(t, \omega_{mn})$  ima dobro definisani maksimum (engl. peak) širine  $2\pi/t$  pri  $\omega_{mn} = 0$ , prelazi će

se uglavnom desiti u takva stanja koja imaju energiju u traci širine  $\delta E \cong 2\pi\hbar/t$  oko energije početnog stanja. To znači da pri prelazu energija ostaje očuvana do na vrijednost reda  $\delta E \cong 2\pi\hbar/t$ . Za  $t \rightarrow \infty$  (pa prema tome i za  $T \rightarrow \infty$ ) nema prelaza. Ovo je intuitivno jasno zato što perturbacija koja je konstantna svo vrijeme ne može dovesti do prijelaza.

## 2.3 Prelazi između kontinuiranih stanja

Do sada smo razmatrali neperturbovani operator  $\hat{H}_0$  koji je imao samo diskretan i nedegenerisan spektar. Razvijeni formalizam se lako može generalizirati na degenerisana stanja. Međutim, generalizacija na kontinuirana stanja je nešto komplikovanija i razmotrit ćemo je detaljnije u ovom odjeljku. Takva generalizacija je često od velikog praktičnog značaja. Primjeri su jonizacija atoma pod uticajem vanjskog polja (prelaz iz diskretnog vezanog stanja u kontinuirano stanje – slika 2.4a) i kočće zračenje kao rezultat ubrzavanja ili usporavanja naelektrisanih čestica u polju (kontinuum-kontinuum prelaz – slika 2.4b).

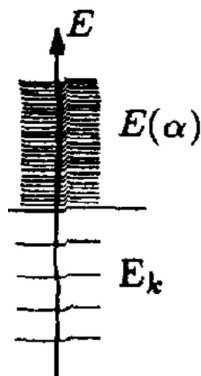


Slika 2.4: a) Prelaz iz diskretnog u kontinuirano stanje u toku jonizacije.  
b) Prelaz iz kontinuiranog stanja  $\Psi_{E_1}$  u kontinuirano stanje  $\Psi_{E_2}$  u toku kočćeg zračenja (bremsstrahlung) uz emisiju fotona energije  $\hbar\omega = E_1 - E_2$ .

Ako operator  $\hat{H}_0$  ima također i kontinuirani spektar (vidjeti sliku 2.5), tada vrijede slijedeće relacije za vlastite funkcije:

$$\hat{H}_0\psi_k(\mathbf{r}) = E_k\psi_k(\mathbf{r}), \quad \hat{H}_0\psi_\alpha(\mathbf{r}) = E_\alpha\psi_\alpha(\mathbf{r}). \quad (2.35)$$





Slika 2.5: Spektar sa diskretnim ( $E_k$ ) i sa kontinuiranim ( $E_\alpha$ ) dijelom.

Ovdje grčki indeks  $\alpha$  karakteriše kontinuirana stanja spektra. Odgovarajuća rješenja vremenski zavisne Schrödingerove jednačine su:

$$\tilde{\psi}_k(\mathbf{r}, t) = \psi_k(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_k t\right), \quad \tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \psi_\alpha(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_\alpha t\right). \quad (2.36)$$

Za normiranje vlastitih funkcija diskretnog spektra ponovo vrijedi:

$$\int \tilde{\psi}_{k'}^*(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}_k(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \delta_{k'k}. \quad (2.37)$$

Diskretna i kontinuirana stanja su ortogonalna, tako da je:

$$\int \tilde{\psi}_k^*(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = 0. \quad (2.38)$$

Normiranje talasnih funkcija koje karakterišu kontinuirani spektar je dato sa:

$$\int \tilde{\psi}_{\alpha'}^*(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \frac{1}{n(\alpha)} \delta(\alpha - \alpha'), \quad (2.39)$$

gdje je  $n(\alpha) > 0$ . Očito je da su funkcije  $\tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \sqrt{n(\alpha)} \tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t)$  normirane na delta funkciju.

Pri rješavanju perturbovanog problema moramo koristiti sve vlastite funkcije, tj. kompletan skup funkcija, tako da dobijamo linearnu kombinaciju:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k a_k(t) \tilde{\psi}_k(\mathbf{r}, t) + \int a_\alpha(t) \tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) d\alpha. \quad (2.40)$$

Uvrštavajući ovo u Schrödingerovu jednačinu

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = [\hat{H}_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, t)] \psi, \quad (2.41)$$

dobijamo

$$i\hbar \left[ \sum_k \frac{da_k(t)}{dt} \tilde{\psi}_k + \int \frac{da_\alpha(t)}{dt} \tilde{\psi}_\alpha d\alpha \right] = \sum_k a_k(t) V \tilde{\psi}_k + \int a_\alpha(t) V \tilde{\psi}_\alpha d\alpha. \quad (2.42)$$

Uvedimo oznake:

$$V_{\sigma\tau}(t) \equiv \int \psi_\sigma^* V(\mathbf{r}, t) \psi_\tau d\mathbf{r}, \quad \omega_{\sigma\tau} \equiv \frac{1}{\hbar} (E_\sigma - E_\tau), \quad (2.43)$$

gdje je  $E_\sigma = E(\alpha)$  ili  $E_\sigma = E_k$ , u zavisnosti od toga kojem dijelu spektra indeks  $\sigma$  odgovara. Tada, kao i u slučaju kada smo analizirali samo diskretni dio spektra, dobijamo sistem spregnutih diferencijalnih jednačina:

$$i\hbar \frac{da_{k'}(t)}{dt} = \sum_k a_k(t) e^{i\omega_{k'k}t} V_{k'k}(t) + \int a_\alpha(t) e^{i\omega_{k'\alpha}t} V_{k'\alpha}(t) d\alpha, \quad (2.44)$$

$$\frac{1}{n(\alpha')} i\hbar \frac{da_{\alpha'}(t)}{dt} = \sum_k a_k(t) e^{i\omega_{\alpha'k}t} V_{\alpha'k}(t) + \int a_\alpha(t) e^{i\omega_{\alpha'\alpha}t} V_{\alpha'\alpha}(t) d\alpha. \quad (2.45)$$

Fizikalni smisao koeficijenata  $a_k$  je isti kao i u slučaju postojanja samo diskretnog spektra. Da bismo odredili smisao koeficijenata  $a_\alpha(t)$  iskoristit ćemo lako provjerljivu relaciju

$$1 = \int \psi^* \psi d\mathbf{r} = \sum_k |a_k|^2 + \int |a_\alpha(t)|^2 \frac{1}{n(\alpha)} d\alpha. \quad (2.46)$$

Dakle, za talasne funkcije kontinuiranog dijela spektra izraz

$$|a_\alpha(t)|^2 \frac{1}{n(\alpha)} d\alpha \quad (2.47)$$

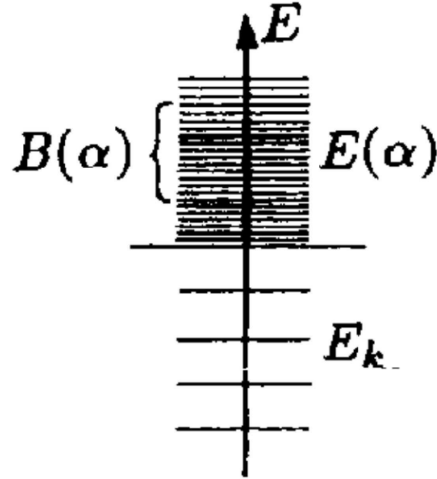
ima smisao vjerovatnoće. Preciznije, izraz (2.47) predstavlja vjerovatnoću da se sistem nađe u stanjima  $\psi_\beta$  sa vrijednošću kontinuiranog parametra  $\beta$  u intervalu između  $\alpha$  i  $\alpha + d\alpha$ .

### Projektori

Označit ćemo sa  $B(\alpha)$  interval vrijednosti parametra  $\alpha$  koji odgovara grupi susjednih stanja predstavljenih na slici 2.6 i definisati operator

$$\hat{P}_B = \int_{B(\alpha)} |\tilde{\psi}_\alpha(t)\rangle n(\alpha) d\alpha \langle \tilde{\psi}_\alpha(t)|, \quad (2.48)$$

gdje je ket vektor  $|\tilde{\psi}_\alpha(t)\rangle$  definisan u koordinatnoj reprezentaciji kao:  
 $\langle \mathbf{r} | \tilde{\psi}_\alpha(t) \rangle = \tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \psi_\alpha \rangle e^{-iE(\alpha)t/\hbar} = \psi_\alpha(\mathbf{r}) e^{-iE(\alpha)t/\hbar}$ . Operator  $\hat{P}_B$  predstavlja projektor (projekcioni operator) na stanja u intervalu  $B(\alpha)$  i karakteriše se vrijednostima parametra  $\alpha$  unutar područja vrijednosti  $B(\alpha)$ . Projektor djeluje na slijedeći način:



Slika 2.6: Domen  $B(\alpha)$  kontinuiranog spektra.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \hat{P}_B | \psi(t) \rangle &= \langle \mathbf{r} | \int_{B(\alpha)} |\tilde{\psi}_\alpha(t)\rangle n(\alpha) d\alpha \langle \tilde{\psi}_\alpha(t) | \int d\mathbf{r}' |\mathbf{r}'\rangle \langle \mathbf{r}' | \psi(t) \rangle \\ &= \int_{B(\alpha)} \tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) n(\alpha) d\alpha \int d\mathbf{r}' \tilde{\psi}_\alpha^*(\mathbf{r}', t) \psi(\mathbf{r}', t), \end{aligned} \quad (2.49)$$

tako da za proizvoljnu funkciju  $\psi(\mathbf{r}, t)$ , jednačina (2.40), vrijedi:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \hat{P}_B | \psi(t) \rangle &= \int_{B(\alpha)} d\alpha \tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) n(\alpha) \left\{ \sum_k a_k(t) e^{i[E(\alpha) - E_k]t/\hbar} \int d\mathbf{r}' \psi_\alpha^*(\mathbf{r}') \psi_k(\mathbf{r}') \right. \\ &\quad \left. + \int d\alpha' a_{\alpha'}(t) e^{i[E(\alpha) - E(\alpha')]t/\hbar} \int d\mathbf{r}' \psi_\alpha^*(\mathbf{r}') \psi_{\alpha'}(\mathbf{r}') \right\}, \\ &= \int_{B(\alpha)} d\alpha \tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) n(\alpha) \int d\alpha' a_{\alpha'}(t) e^{i[E(\alpha) - E(\alpha')]t/\hbar} \frac{1}{n(\alpha)} \delta(\alpha - \alpha') \\ &= \int_{B(\alpha)} d\alpha a_\alpha(t) \tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (2.50)$$

Dakle, operator  $\hat{P}_B$  projektuje opštu talasnu funkciju  $\psi$  na domen stanja  $\tilde{\psi}_\alpha$  koja se karakterišu vrijednošću  $\alpha$  unutar intervala  $B(\alpha)$ . Ako transformišemo

varijablu  $\alpha$  u novu varijablu – energiju  $E(\alpha)$  – i označimo odgovarajuće područje vrijednosti energija sa  $B(E)$ , tada projektor možemo napisati kao:

$$\hat{P}_B = \int_{B(E)} |\tilde{\psi}_\alpha(t)\rangle \rho_\alpha(E) dE \langle \tilde{\psi}_\alpha(t)|, \quad (2.51)$$

gdje je

$$\rho_\alpha(E) = n(\alpha) \frac{d\alpha}{dE} \quad (2.52)$$

gustoća stanja  $\alpha$  pri energiji  $E$ . Veličina  $\rho_\alpha(E)$  predstavlja broj stanja po jedinici energije. Lako se može projeriti da je operator  $\hat{P}_B$  hermitski, tj.

$$\hat{P}_B^\dagger = \hat{P}_B, \quad (2.53)$$

i idempotentan, tj.

$$\hat{P}_B^2 = \hat{P}_B. \quad (2.54)$$

Vratimo se sada proračunu vjerovatnoća prelaza. Pošto  $\hat{P}_B|\psi(t)\rangle$  izdvađa dio talasne funkcije sa stanjima  $\psi_\alpha$ ,  $\alpha \in B(\alpha)$ , to je  $\int d\mathbf{r} \left| \langle \mathbf{r} | \hat{P}_B |\psi(t)\rangle \right|^2$  vjerovatnoća da se sistem nađe u stanju sa  $\alpha \in B(\alpha)$ . Označavajući tu vjerovatnoću sa  $W_B$ , nalazimo da je

$$\begin{aligned} W_B &\equiv \int d\mathbf{r} \left| \langle \mathbf{r} | \hat{P}_B |\psi(t)\rangle \right|^2 = \int d\mathbf{r} \langle \mathbf{r} | \hat{P}_B |\psi(t)\rangle^* \langle \mathbf{r} | \hat{P}_B |\psi(t)\rangle \\ &= \langle \psi(t) | \hat{P}_B \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| \hat{P}_B |\psi(t)\rangle = \langle \psi(t) | \hat{P}_B^2 |\psi(t)\rangle \\ &= \langle \psi(t) | \hat{P}_B |\psi(t)\rangle = \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}, t) \langle \mathbf{r} | \hat{P}_B |\psi(t)\rangle \\ &= \int d\mathbf{r} \left[ \sum_k a_k(t) \tilde{\psi}_k(\mathbf{r}, t) + \int a_{\alpha'}(t) \tilde{\psi}_{\alpha'}(\mathbf{r}, t) d\alpha' \right]^* \int_{B(\alpha)} d\alpha a_\alpha(t) \tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) \\ &= \int d\alpha' a_{\alpha'}^*(t) \int_{B(\alpha)} d\alpha a_\alpha(t) \frac{1}{n(\alpha)} \delta(\alpha - \alpha') \\ &= \int_{B(\alpha)} \left| \frac{a_\alpha(t)}{n(\alpha)} \right|^2 n(\alpha) d\alpha = \int_{B(E)} \left| \frac{a_\alpha(t)}{n(\alpha)} \right|^2 \rho_\alpha(E) dE. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Sada lako možemo odrediti vjerovatnoću prelaza u slučaju kada se sistem u početnom trenutku nalazio u stanju  $n$  diskretnog spektra, tj. kada je  $a_k(0) = \delta_{nk}$ ,  $a_\alpha(0) = 0$ . Na osnovu (2.44) i (2.45) dobijamo:

$$i\hbar \frac{da_k^{(1)}(t)}{dt} = e^{i\omega_{kn}t} V_{kn}(t), \quad \frac{1}{n(\alpha)} i\hbar \frac{da_\alpha^{(1)}(t)}{dt} = e^{i\omega_{\alpha n}t} V_{\alpha n}(t). \quad (2.56)$$

Za diskretni dio spektra nema promjena u odnosu na raniji rezultat (2.20). Zato ćemo ovdje dalje analizirati samo drugu jednačinu koja opisuje prelaze u kontinuirani spektar. Integriranjem nalazimo da je:

$$\frac{a_\alpha^{(1)}(t)}{n(\alpha)} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{\alpha n}(\tau) e^{i\omega_{\alpha n}\tau} d\tau, \quad (2.57)$$

tako da je

$$\begin{aligned} W_{n \rightarrow B} &= \int_{B(E)} \left| \frac{a_\alpha^{(1)}(t)}{n(\alpha)} \right|^2 \rho_\alpha(E) dE \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \int_{B(E)} \left| \int_0^t V_{\alpha n}(\tau) e^{i\omega_{\alpha n}\tau} d\tau \right|^2 \rho_\alpha(E) dE \end{aligned} \quad (2.58)$$

vjerovatnoća prelaza – vjerovatnoća da se sistem u nekom kasnijem trenutku nađe u stanjima  $\tilde{\psi}_\alpha(E)$  pri čemu je  $E$  u oblasti  $B(E)$ .

Ako početno stanje, karakterisano sa  $\alpha = \beta$ , pripada kontinuumu, tada je  $a_k(0) = 0$  i  $a_\alpha(0) = \delta(\beta - \alpha)$  i dobija se potpuno analogan rezultat:

$$\frac{a_\alpha^{(1)}(t)}{n(\alpha)} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{\alpha\beta}(\tau) e^{i\omega_{\alpha\beta}\tau} d\tau. \quad (2.59)$$

To vodi na vjerovatnoću prelaza:

$$W_{\beta \rightarrow B} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{B(E)} \left| \int_0^t V_{\alpha\beta}(\tau) e^{i\omega_{\alpha\beta}\tau} d\tau \right|^2 \rho_\alpha(E) dE. \quad (2.60)$$

Ako je perturbacija konstantna u vremenskom intervalu  $0 < t < T$ , tj. vrijedi (2.30), tada je

$$V_{\alpha\beta}(\tau) \equiv \int d\mathbf{r} \psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \hat{V}(\mathbf{r}) \psi_\beta(\mathbf{r}) = V_{\alpha\beta}, \quad (2.61)$$

tako da je

$$W_{\beta \rightarrow B} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{B(E)} |V_{\alpha\beta}|^2 f(t, \omega_{\alpha\beta}) \rho_\alpha(E) dE, \quad (2.62)$$

gdje je  $f(t, \omega)$  dato sa (2.32). U jednačini (2.62) kvadrat matričnog elementa  $|V_{\alpha\beta}|^2$  se ne može izvući ispred integrala zato što je povezan sa varijablom integriranja preko  $\alpha = \alpha(E)$ . Izuzev toga, rezultat (2.62) je potpuno analogan ranijem rezultatu (2.31), s tim što se u (2.62) pojavljuje gustoća konačnih stanja  $\rho_\alpha(E)$ . Ako su ta konačna stanja koncentrisana oko stanja sa energijom  $E_1$ , tj.  $\rho_\alpha(E) = \delta(E - E_1)$  tada se (2.62) odmah svodi na jednačinu oblika (2.31).

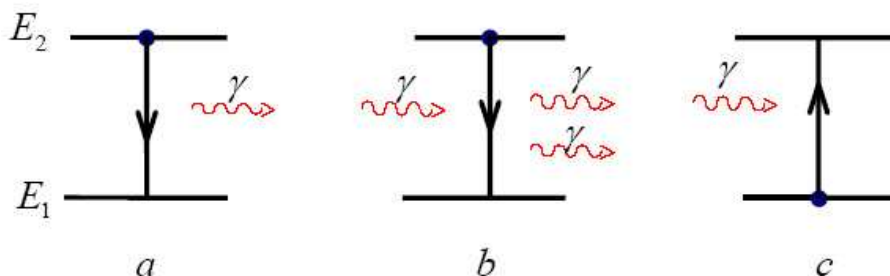
## 2.4 Fermijevo zlatno pravilo

(na vježbama)

## 2.5 Spontana i stimulisana emisija i apsorpcija

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 data Planckovom formulom:

$$w_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{v^3} \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}. \quad (2.63)$$



Slika 2.7: Šematski dijagram procesa spontane emisije (a), stimulisane emisije (b) i apsorpcije (c).

U sredini se odvijaju procesi spontane emisije, stimulisane emisije i apsorpcije. Ti procesi su fundamentalni za razumijevanje rada lasera. Da bismo ih objasnili, podsjetimo se da pod pojmom sredine podrazumijevamo sistem atoma ili molekula koji se karakteriše skupom kvantnih stanja i njima odgovarajućih energija. Izdvojimo iz tog skupa dva energetska nivoa – osnovni nivo 1 sa energijom  $E_1$  i pobuđeni nivo 2 čija je energija  $E_2$  ( $E_2 > E_1$ , vidjeti sliku 2.7). U slučaju spontane emisije [slika 2.7(a)] atom se u početnom trenutku nalazi u stanju koje odgovara nivou 2. Pošto je  $E_2 > E_1$ , atom teži da pređe na nivo 1. Pri tome prelazu izdvađa se energija  $E_2 - E_1$  kao energija spontano emitovanog fotona  $\gamma$ . Frekvencija emitovanog fotona je  $\nu = (E_2 - E_1)/h$ .

Analizirajmo sada proces stimulisane (prinudne) emisije. Pretpostavimo ponovo da se u početnom trenutku atom nalazi na višem nivou 2 i da uz to na

sredinu pada elektromagnetni talas frekvencije  $\nu = (E_2 - E_1)/h$ . Frekvencija upadnog talasa jednaka je frekvenciji spontano emitovanog talasa, što znači da postoji mogućnost da upadni talas stimuliše prelaz atoma sa nivoa 2 na nivo 1. Pri tome će se razlika energija  $E_2 - E_1$  izdvojiti u vidu energije elektromagnetnog talasa koji će biti dodan upadnom [slika 2.7(b)]. Između procesa spontane i stimulisane emisije postoji bitna razlika. U slučaju spontane emisije atom emituje elektromagnetni talas čija faza i smjer prostiranja mogu biti različiti od talasa emitovanog drugim atomom te iste sredine. Za razliku od toga, u slučaju stimulisane emisije, pošto je proces iniciran upadnim elektromagnetnim talasom, emisija svih atoma te sredine se dodaje tom upadnom talasu i ima istu fazu i smjer prostiranja. U slučaju procesa apsorpcije atom se u početnom trenutku nalazi na nivou 1 i na sredinu pada elektromagnetni talas frekvencije  $\nu = (E_2 - E_1)/h$ . Apsorpcijom fotona  $\gamma$  atom prelazi u pobuđeno stanje 2 [slika 2.7(c)]. Tri procesa koja smo upravo opisali i koji su predstavljeni na slici 2.7, na “jeziku fotona” mogu se opisati na slijedeći način: a) pri spontanoj emisiji atom, emitujući foton, prelazi sa nivoa 2 na nivo 1; b) pri prinudnoj emisiji upadni foton izaziva prelaz  $2 \rightarrow 1$ , uslijed čega “dobijamo” dva fotona (upadni plus emitovani); c) pri apsorpciji upadni foton se apsorbuje, izazivajući prelaz  $1 \rightarrow 2$ .

## 2.6 Veza spontane i stimulisane emisije i apsorpcije – Einsteinov termodinamički pristup

Analizirajmo sada slučaj kada su u sredini izdvojena dva nivoa  $n$  i  $m$ . Pošto se cijeli sistem nalazi u stanju termodinamičke ravnoteže, broj prelaza sa nižeg energetskeg 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  $B$ ):

$$W_{mn} = B_{mn}w_{\nu_0}, \quad W_{nm} = B_{nm}w_{\nu_0}, \quad (2.64)$$

gdje je  $\nu_0 \equiv \nu_{nm} = (E_n - E_m)/h$ . Naseljenost ili populacija nivoa se definiše kao broj atoma u jedinici zapremine koji se nalazi u stanju koje odgovara tom nivou. Neka su  $N_n$  i  $N_m$  ravnotežne naseljenosti nivoa  $n$  i  $m$ . Tada uslov termodinamičke ravnoteže glasi:

$$A_{nm}N_n + B_{nm}w_{\nu_0}N_n = B_{mn}w_{\nu_0}N_m. \quad (2.65)$$

Prema Boltzmannovoj statistici je:

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{g_n}{g_m} \exp\left(-\frac{h\nu_0}{k_B T}\right), \quad (2.66)$$

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 (2.65), dobija:

$$w_{\nu_0} = \frac{g_n A_{nm}}{g_m B_{mn} e^{\frac{h\nu_0}{k_B T}} - g_n B_{nm}}. \quad (2.67)$$

Poređenjem (2.67) sa Planckovom formulom (2.63) zaključujemo da je:

$$g_m B_{mn} = g_n B_{nm}, \quad A_{nm} = B_{nm} \frac{8\pi\nu_0^2}{v^3} h\nu_0 = B_{nm} 8\pi h \left(\frac{\nu_0}{v}\right)^3. \quad (2.68)$$

Prva jednačina u (2.68) pokazuje da su vjerovatnoća apsorpcije i vjerovatnoća stimulisane emisije, uzrokovane zračenjem crnog tijela, u slučaju jednake degeneracije nivoa ( $g_n = g_m$ ), jednake. Druga jednačina u (2.68) omogućava da se izračuna koeficijent  $A_{nm}$ , na osnovu poznatog koeficijenta  $B_{nm}$ . Koeficijent  $B_{nm}$  se može izračunati primjenom formalizma kvantne mehanike.

## 2.7 Izvođenje jednačine za vjerovatnoću apsorpcije

Pri poluklasičnom pristupu atomski sistem se opisuje zakonima kvantne mehanike, a elektromagnetno polje upadnog talasa se opisuje klasično – pomoću Maxswellovih jednačina. Pretpostavimo da je atomski sistem opisan sa dva nivoa (1 i 2) i da se u trenutku  $t = 0$  nalazi u osnovnom stanju 1. Sa klasične tačke gledišta atom, uslijed interakcije sa elektromagnetnim poljem, dobija dopunsku energiju  $H'$  (npr. uslijed interakcije električnog dipolnog momenta atoma  $\boldsymbol{\mu}_e$  sa električnim poljem  $\mathbf{E}$  je  $H' = \boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{E}$  električna dipolna interakcija; analogno je  $H' = \boldsymbol{\mu}_m \cdot \mathbf{B}$  magnetna dipolna interakcija). Vremensku evoluciju toga atomskog sistema sa dva nivoa u interakciji sa elektromagnetnim poljem ćemo opisivati pomoću kvantne mehanike. Kvantno-mehanički operator ukupne energije – hamiltonijan  $\hat{H}$  – sastoji se od hamiltonijana  $\hat{H}_0$  atoma u odsustvu elektromagnetnog polja i hamiltonijana interakcije sa monohromatskim elektromagnetnim talasom frekvencije  $\omega = 2\pi\nu$  (uzimamo u obzir samo elektro-dipolnu interakciju):

$$\hat{H}' = e\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\mathbf{r}}, \quad (2.69)$$



gdje je  $-e$  - naelektrisanje elektrona,  $\mathbf{r}$  - koordinata toga elektrona [pretpostavljamo da je ishodište koordinatnog sistema ( $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ ) smješteno u jezgru atoma], a  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  - električno polje u tački  $\mathbf{r}$ . Totalni hamiltonijan

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \quad (2.70)$$

i talasna funkcija atoma  $\Psi$  zadovoljavaju Schrödingerovu jednačinu

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}. \quad (2.71)$$

Da bismo riješili ovu jednačinu po  $\Psi$ , uvedimo neperturbovane svojstvene funkcije nivoa 1 i 2:

$$\Psi_j = u_j e^{-iE_j t/\hbar}, \quad j = 1, 2. \quad (2.72)$$

Funkcije  $u_j$  zadovoljavaju stacionarnu Schrödingerovu jednačinu

$$\hat{H}_0 u_j = E_j u_j, \quad j = 1, 2. \quad (2.73)$$

Totalnu talasnu funkciju atoma koji interaguje sa elektromagnetnim poljem možemo napisati u obliku:

$$\Psi = a_1(t)\Psi_1 + a_2(t)\Psi_2, \quad (2.74)$$

gdje su, u opštem slučaju,  $a_1$  i  $a_2$  kompleksni brojevi koji zavise od vremena i za koje vrijedi:

$$|a_1(t)|^2 + |a_2(t)|^2 = 1, \quad (2.75)$$

što fizikalno označava da je suma vjerovatnoće da se atom u trenutku  $t$  nađe u stanju 1 i vjerovatnoće da se atom u trenutku  $t$  nađe u stanju 2 jednaka jedinici. Uvrštavajući (2.74) u Schrödingerovu jednačinu (2.71), koristeći relacije (2.70), (2.72) i (2.73), relaciju ortonormiranosti  $\int u_n^* u_m d\mathbf{r} = \delta_{nm}$  i označavajući:

$$H'_{nm}(t) = \int u_n^* \hat{H}' u_m d\mathbf{r}, \quad (2.76)$$

dobijamo slijedeći sistem od dvije jednačine:

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{a}_1 &= H'_{11}a_1 + H'_{12}a_2 e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar}, \\ i\hbar\dot{a}_2 &= H'_{21}a_1 e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} + H'_{22}a_2, \end{aligned} \quad (2.77)$$

koji treba riješiti uz početni uslov:

$$a_1(0) = 1, \quad a_2(0) = 0. \quad (2.78)$$

Rješenje ćemo dati u prvom redu računa perturbacije. Pretpostavimo da se na desnoj strani jednačine (2.77) može staviti:  $a_1(t) \approx 1$ ,  $a_2(t) \approx 0$ . U tom, prvom redu, (2.77) se svodi na:

$$\dot{a}_1 = H'_{11}/(i\hbar), \quad \dot{a}_2 = H'_{21}e^{i\omega_0 t}/(i\hbar), \quad \hbar\omega_0 = h\nu_0 = E_2 - E_1, \quad (2.79)$$

gdje je  $\nu_0$  frekvencija atomskog prelaza. Vektor električnog polja klasičnog ravnog elektromagnetnog talasa je:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}_0) \sin(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}). \quad (2.80)$$

Koristit ćemo tzv. elektro-dipolnu aproksimaciju prema kojoj se član  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$  može zanemariti u izrazu  $\sin(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ . Dimenzije atoma su  $\propto 0,5$  nm tako da je za vidljivu svjetlost ( $\lambda \propto 500$  nm):  $k(\mathbf{r}) \propto 2\pi \cdot 0,5/500 \Rightarrow \sin(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \approx \sin \omega t$ . U tom slučaju možemo izdvojiti vremenski nezavisnu interakciju:

$$H'_{21}{}^0 = e \int u_2^* \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{r}} u_1 d\mathbf{r} \approx \mathbf{E}_0 \cdot \boldsymbol{\mu}_{21}, \quad (2.81)$$

gdje je

$$\boldsymbol{\mu}_{21} = e \int u_2^* \hat{\mathbf{r}} u_1 d\mathbf{r} \quad (2.82)$$

matrični element električnog dipolnog momenta, a znak približne jednakosti u (2.81) se odnosi na primjenu aproksimacije  $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \approx \mathbf{E}_0(\mathbf{0}) = \mathbf{E}_0$ .  $\mathbf{E}_0$  je izvučeno ispred znaka integrala. Na osnovu (2.81), (2.82) i početnog uslova  $a_2(0) = 0$ , iz druge relacije u (2.79) dobijamo:

$$a_2(t) = \frac{H'_{21}{}^0}{2i\hbar} \left[ \frac{e^{i(\omega_0 - \omega)t} - 1}{\omega_0 - \omega} - \frac{e^{i(\omega_0 + \omega)t} - 1}{\omega_0 + \omega} \right]. \quad (2.83)$$

Pošto je  $\omega \approx \omega_0$ , prvi član u uglastim zagradama u (2.83) je mnogo veći od drugoga, tako da je:

$$|a_2(t)|^2 = \frac{|H'_{21}{}^0|^2}{\hbar^2} \left\{ \frac{\sin((\omega - \omega_0)t/2)}{\omega - \omega_0} \right\}^2. \quad (2.84)$$

Uzimajući u obzir da je jedna od definicija Diracove  $\delta$ -funkcije:

$$\delta(\omega - \omega_0) = \frac{2}{\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2((\omega - \omega_0)t/2)}{(\omega - \omega_0)^2 t}, \quad (2.85)$$

možemo, za velike vrijednosti  $t$ , pisati da je vjerovatnoća prelaza  $1 \rightarrow 2$  u jedinici vremena data sa:

$$W_{12} = \frac{|a_2(t)|^2}{t} = \frac{\pi}{2} \frac{|H'_{21}{}^0|^2}{\hbar^2} \delta(\omega - \omega_0). \quad (2.86)$$

Da bismo izračunali matrični element  $|H'_{21}{}^0|^2$ , označimo sa  $\theta$  ugao između vektora  $\boldsymbol{\mu}_{21}$  i  $\mathbf{E}_0$ . Na osnovu (2.81) i (2.82) dobijamo:

$$|H'_{21}{}^0|^2 = E_0^2 |\mu_{21}|^2 \cos^2 \theta. \quad (2.87)$$

Pretpostavimo da elektromagnetno polje interaguje sa nekoliko atoma čiji su vektori  $\boldsymbol{\mu}_{21}$  orijentisani na proizvoljan način u odnosu na vektor  $\mathbf{E}_0$ . Tada se srednja vrijednost  $|H'_{21}{}^0|^2$  dobija usrednjavanjem (2.87) po svim mogućim vrijednostima  $\cos^2 \theta$ . Pošto je svaki od uglova  $\theta$  jednako vjerovatan, to je  $\langle \cos^2 \theta \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta / (4\pi) = \int_{-1}^1 u^2 du / 2 = 1/3$ , gdje uglaste zagrade označavaju srednju vrijednost. Dakle, vrijedi:

$$\langle |H'_{21}{}^0|^2 \rangle = E_0^2 |\mu_{21}|^2 / 3. \quad (2.88)$$

Uvrštavajući (2.88) u (2.86), i uzimajući u obzir osobinu  $\delta$ -funkcije  $\delta(\omega - \omega_0) = \delta(\nu - \nu_0) / (2\pi)$ , dobijamo:

$$W_{12} = \frac{\pi^2}{3h^2} E_0^2 |\mu_{21}|^2 \delta(\nu - \nu_0). \quad (2.89)$$

Povežimo ovaj izraz sa gustoćom energije ravnog elektromagnetnog talasa. Ona je data sa  $w = (\varepsilon E^2 + \mu H^2) / 2$ , što se, koristeći vezu jačina električnog i magnetnog polja:  $H = (\varepsilon/\mu)^{1/2} E$ , može napisati kao  $w = \varepsilon E^2$ . Za ravni elektromagnetni talas je  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \sin \omega t$ , tako da je gustoća energije, usrednjena po periodu  $T = 2\pi/\omega$ ,  $\bar{w} = \int_0^T w dt / T = \varepsilon E_0^2 \int_0^T \sin^2 \omega t dt / T = \varepsilon E_0^2 / 2$ . Za  $\mu = \mu_0$ , na osnovu  $\varepsilon \mu v^2 = 1$ ,  $\varepsilon_0 \mu_0 c^2 = 1$  i  $vn = c$ , je  $\varepsilon = \varepsilon_0 n^2$ , tako da je:

$$\bar{w} = \varepsilon_0 n^2 E_0^2 / 2, \quad (2.90)$$

gdje je  $n$  indeks prelamanja za atomski sistem. Uvrštavajući (2.90) u (2.89), dobijamo da je vjerovatnoća apsorpcije u jedinici vremena fotona frekvencije  $\nu$  atomom koji se karakteriše frekvencijom  $\nu_0 = (E_2 - E_1)/h$  i koji je obasjan ravnim monohromatskim elektromagnetnim talasom frekvencije  $\nu$  i gustoće energije  $\bar{w}(\nu)$ , data sa:

$$W_{12}(\nu) = \frac{2\pi^2}{3\varepsilon_0 h^2} \frac{|\mu_{21}|^2}{n^2} \bar{w}(\nu) \delta(\nu - \nu_0). \quad (2.91)$$

Ova formula, u granicama aproksimacije koju smo koristili, vrijedi samo za ravni elektromagnetni talas konstantnog intenziteta i frekvencije. Na osnovu osobine Diracove  $\delta$ -funkcije:  $\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases}$ , dobija se da je za  $\nu = \nu_0$ ,

tj. kada se frekvencija elektromagnetnog talasa podudara sa frekvencijom atomskog prelaza,  $W_{12} = \infty$ , a za  $\nu \neq \nu_0$  je  $W_{12} = 0$ . To je fizikalno neprihvatljivo. Ako se vratimo na mjesto gdje smo uveli  $\delta$ -funkciju [jednačine (2.85) i (2.86)], vidimo da smo je dobili za  $t \rightarrow \infty$ . Time smo pretpostavili da je interakcija elektromagnetnog talasa i atomskog sistema ista u svakom trenutku, što naravno nije tačno. Elektromagnetni talas sa tačke gledišta atoma nije monohromatski. Zato je pravilnije posmatrati relaciju (2.91) kao vezu vjerovatnoće  $W_{\nu,12}d\nu$  apsorpcije (u jedinici vremena) fotona frekvencije iz intervala  $[\nu, \nu + d\nu]$  sa spektralnom gustoćom energije  $w_\nu$ , a  $\delta$ -funkciju, koja je idealizacija, zamijeniti sa stvarnom formom spektralne linije  $g(\nu, \nu_0)$  (vidjeti naredni odjeljak). Dobija se:

$$W_{\nu,12}d\nu = \frac{2\pi^2}{3\varepsilon_0 h^2} \frac{|\mu_{21}|^2}{n^2} g(\nu, \nu_0) w_\nu d\nu. \quad (2.92)$$

Izraz za vjerovatnoću stimulisanе emisije može izvesti na analogan način, polazeći od (2.77), ali uz početni uslov različit od (2.78):  $a_1(0) = 0$ ,  $a_2(0) = 1$ . Traženi rezultati se mogu dobiti jednostavnom zamjenom indeksa 1 i 2.

U opštijem slučaju, vjerovatnoća apsorpcije (u jedinici vremena) fotona sa frekvencijom iz intervala  $[\nu, \nu + d\nu]$ , pri čemu elektron sa nižeg nivoa  $m$  prelazi na viši nivo  $n$  ( $h\nu_0 = E_n - E_m$ ), je data sa:

$$W_{\nu,mn}d\nu = \frac{2\pi^2}{3\varepsilon_0 h^2} \frac{\mu_{mn}^2}{n^2} g(\nu, \nu_0) w_\nu d\nu. \quad (2.93)$$

U jednačini (2.93)  $\mu_{mn}$  je modul matričnog elementa električnog dipolnog momenta, koji zavisi od prirode sredine, a  $g(\nu, \nu_0)$  je funkcija koja opisuje formu spektralne linije (npr. Lorentzova forma ili Gaussova forma; vidjeti naredni odjeljak). Funkcija  $g(\nu, \nu_0)$  je normirana:  $\int_0^\infty g(\nu, \nu_0) d\nu = 1$ . Njen konkretan oblik zavisi od mehanizma širenja linije i može se izračunati na osnovu eksperimentalno izmjerene forme emisione linije. Širina spektralne linije je obično vrlo uska, tako da funkcija  $g(\nu, \nu_0)$  ima oštar maksimum za  $\nu = \nu_0$  i ponaša se kao Diracova  $\delta$ -funkcija, za koju vrijedi:  $\int dx f(x) \delta(x - x_0) = f(x_0)$ , gdje oblast integriranja obuhvata tačku  $x = x_0$ , a  $f(x)$  je proizvoljna funkcija. Integriranjem (2.93) po frekvenciji  $\nu$ , u uskom intervalu oko  $\nu_0$  (što odgovara proširenoj spektralnoj liniji), i koristeći formulu  $\int d\nu g(\nu, \nu_0) w_\nu = w_{\nu_0}$ , za vjerovatnoću apsorpcije dobijamo:

$$W_{mn} = \frac{2\pi^2}{3\varepsilon_0 h^2} \frac{\mu_{mn}^2}{n^2} w_{\nu_0}. \quad (2.94)$$

Na osnovu jednačina (2.64), (2.68) i (2.94), zaključujemo da su vrijednosti Einsteinovih koeficijenata  $A$  i  $B$  date sa:

$$\text{za apsorpciju: } B_{mn} = \frac{2\pi^2}{3\varepsilon_0 h^2} \frac{\mu_{mn}^2}{n^2}, \quad (2.95)$$

$$\text{za stimulisanu emisiju: } B_{nm} = \frac{2\pi^2}{3\varepsilon_0 h^2} \frac{g_m}{g_n} \frac{\mu_{mn}^2}{n^2}, \quad (2.96)$$

$$\text{za spontanu emisiju: } A_{nm} = \frac{16\pi^3}{3\varepsilon_0 h c^3} \frac{g_m}{g_n} \mu_{mn}^2 n \nu_0^3 = \frac{1}{\tau_{\text{sp},nm}}. \quad (2.97)$$

Jednačina (2.97) ukazuje na to da je vjerovatnoća spontane emisije  $A_{nm}$  proporcionalna sa trećim stepenom frekvencije prelaza sa nivoa  $n$  na nivo  $m$ , pri čemu koeficijent proporcionalnosti zavisi od karakteristika sredine. Izraz za Einsteinov koeficijent spontane emisije koji smo dobili poređenjem rezultata poluklasičnog i termodinamičkog pristupa, može se izvesti i direktnim kvantno-elektrodinamičkim izvođenjem (identičnost dobijenih rezultata ukazuje na to da je Planckova formula korektna i sa stanovišta kvantne elektrodinamike).

Intenzitet talasa  $I$  je energija koja u jedinici vremena prođe kroz jedinicu površine, okomito na smjer energetskega fluksa. On je određen Poyntingovim vektorom  $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ :  $I = \int I_\nu d\nu = |\mathbf{E} \times \mathbf{H}|$ . Uzimajući u obzir da je spektralni intenzitet ukupnog elektromagnetnog talasa

$$I_{\nu_0} = \nu w_{\nu_0}, \quad (2.98)$$

na osnovu jednačine (2.64), prve jednačine u (2.68) i jednačine (2.94), dobija se:

$$W_{mn} = \frac{g_n}{g_m} W_{nm} = \frac{2\pi^2}{3\varepsilon_0 h^2 c} \frac{\mu_{mn}^2}{n} I_{\nu_0}, \quad (2.99)$$

što znači da su vjerovatnoća apsorpcije i vjerovatnoća stimulisane emisije direktno proporcionalne intenzitetu upadnog elektromagnetnog talasa.

## 2.8 Širina i forma spektralne linije

Do sada smo pretpostavljali da su energetske nivoi beskonačno uski. U skladu s tim i spektralna linija frekvencije  $\nu_{nm} = (E_n - E_m)/h$ , koja odgovara prelazu sa nivoa  $E_n$  na nivo  $E_m$ , je beskonačno uska i kažemo da je njoj odgovarajući elektromagnetni talas monohromatski. To je idealizacija. Svaki realni talas laserskog zračenja je *kvazimonohromatski*, tj. to je talas sa srednjom (centralnom) frekvencijom  $\nu_0$ , pri kojoj je energija elektromagnetnog zračenja maksimalna, i nekom širinom spektra  $\Delta\nu_0$ . Frekventni interval u granicama kojega je intenzitet emitovanog ili apsorbovanog zračenja dva puta manji od maksimalnog intenziteta naziva se *širina spektralne linije*  $\Delta\nu_0$ . Širenje spektralnih linija je povezano sa vremenom života pobuđenih kvantnih stanja. Naime, na osnovu Heisenbergove relacije neodređenosti, proizvod neodređenosti energije i vremena je reda veličine  $\hbar = h/(2\pi)$ . Konkretno, ako su  $\tau_n$  i  $\tau_m$

vremena života čestice na nivoima  $n$  i  $m$  tada je neodređenost razlike nivoa  $E_n - E_m$  data sa:

$$\Delta E_{nm} = \Delta E_n + \Delta E_m \propto \hbar \left( \frac{1}{\tau_n} + \frac{1}{\tau_m} \right) = \frac{\hbar}{\tau_{nm}}, \quad (2.100)$$

što znači da je neodređenost frekvencije, tj. širina spektralne linije:

$$\Delta \nu_0 \propto \frac{1}{2\pi\tau_{nm}}. \quad (2.101)$$

Prema tome, širina spektralne linije uzrokovana spontanom emisijom, sa spontanom vremenom života  $\tau_{sp} = 1/A_{nm}$ , je:

$$\Delta \nu_{0,N} = \frac{A_{nm}}{2\pi}. \quad (2.102)$$

To je tzv. prirodna širina spektralne linije (indeks N potiče od engleske riječi *natural* = prirodan). Da je  $\tau_{sp}$  zaista spontano vrijeme života kvantne čestice na pobuđenom nivou može se pokazati slijedećom analizom. Broj čestica koje spontano napuštaju pobuđeni energetski nivo u vremenskom intervalu  $dt$  je  $dN_n = -A_{nm}N_n$ , odakle je  $N_n(t) = N_n(0)e^{-A_{nm}t} = N_n(0)e^{-t/\tau_{sp}}$ , pa je  $\tau_{sp}$  vrijeme za koje se naseljenost pobuđenog nivoa smanji  $e$  puta, a to je upravo definicija vremena života. Prirodna širina linije je obično mala. Pošto ona nije povezana ni sa kakvim vanjskim uticajem, ona se ne može vještački smanjiti.

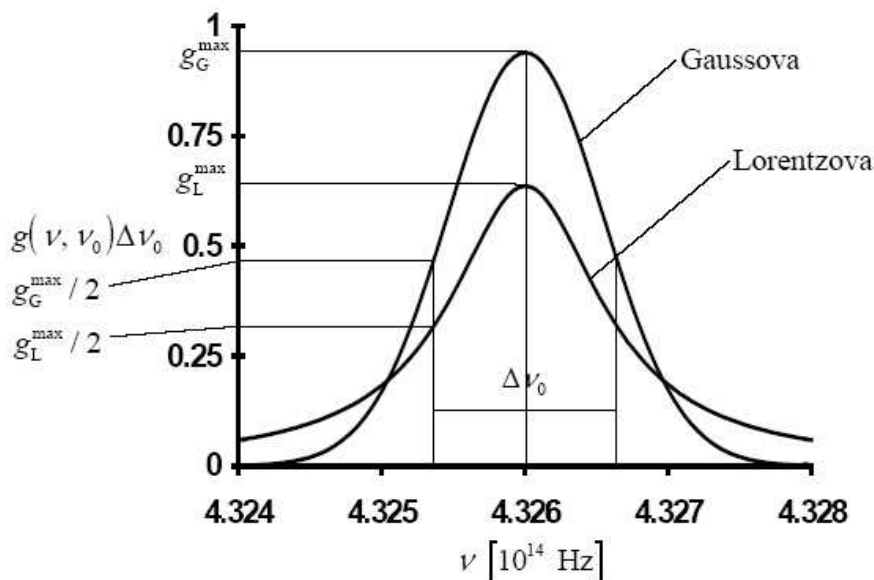
Forma spektralne linije koja odgovara prirodnom širenju je tzv. Lorentz-ova forma linije (vidjeti sliku 2.8), čiji je matematički oblik:

$$g_L(\nu, \nu_0) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta \nu_0/2}{(\nu - \nu_0)^2 + (\Delta \nu_0/2)^2}, \quad (2.103)$$

pri čemu su uslov normiranja i maksimalna vrijednost dati sa:

$$\int_0^\infty g_L(\nu, \nu_0) d\nu = 1, \quad g_L^{\max} = g_L(\nu_0, \nu_0) = \frac{2}{\pi \Delta \nu_0} \approx \frac{0,637}{\Delta \nu_0}. \quad (2.104)$$

Spontana emisija nije jedini uzrok širenja spektralne linije. Praktična širina spektralne linije je često znatno veća od prirodne. Širenja spektralnih linija se mogu podijeliti na *homogena* i *nehomogena*. Homogeno širenje, u koje spada i prirodno širenje, je takvo širenje kod kojeg se linija svakog pojedinog atoma, pa prema tome i cijelog sistema, širi u jednakom stepenu. Nasuprot tome, mehanizam širenja linija je nehomogen kada on djeluje na takav način da su rezonantne frekvencije pojedinih atoma raspoređene u nekoj traci



Slika 2.8: Poređenje Lorentzove i Gaussove forme linije. Obadvije krive su normirane i odnose se na istu širinu  $\Delta \nu_0 = 1,273 \cdot 10^{11}$  Hz, koja odgovara polovini maksimuma prirodno proširene linije rubinskog lasera sa  $\nu_0 = 4,326 \cdot 10^{14}$  Hz.

frekvencija i linija cijelog sistema izgleda proširena i kada nema širenja linija pojedinih atoma.

Pored prirodnog širenja u homogeno širenje linija spada i tzv. *sudarno širenje*. Kod gasova do njega dolazi uslijed sudara atoma sa drugim atomima, jonima, slobodnim elektronima ili zidovima rezonatora. Kod čvrstih tijela ono je posljedica interakcije atoma sa rešetkom (kristala). Sudari narušavaju proces koherentne interakcije atoma sa upadnim elektromagnetnim talasom. Forma linije je i u ovom slučaju Lorentzova, a širina linije je određena srednjim vremenom između dva sudara (engleski: *collision* = sudar), tačnije:

$$\Delta \nu_{0,L} = 1 / (\pi \tau_c). \quad (2.105)$$

Treba napomenuti da postoji suštinska razlika između sudarnog širenja linija i neelastičnih sudarnih procesa koji su odgovorni za prelaze bez emisije ili apsorpcije fotona. Pri neelastičnim sudarnim procesima atom predaje svoju energiju susjednim molekulima – dolazi do relaksacije. S druge strane, širenje linija može biti izazvano i neelastičnim i elastičnim sudarima koji dovode do slučajnih promjena faze emitovanog elektromagnetnog talasa.

Do nehomogenog širenja spektralne linije koju emituju molekule dolazi kada svaki atom ima svoju frekvenciju prelaza. Karakterističan primjer je

tzv. *Dopplerovo širenje* u gasovitim aktivnim sredinama. Uslijed toga što se atomi kreću u različitim smjerovima i sa različitim brzinama  $v_a$ , u emisionom ili apsorpcionom spektru se pojavljuju frekvencije određene Dopplerovim pomakom frekvencija  $\nu - \nu_0 = \pm \nu_0 v_a/c$ . U tom slučaju, u termodinamičkoj ravnoteži, forma spektralne linije je Gaussova:

$$g_G(\nu, \nu_0) = \frac{2}{\Delta\nu_{0,D}} \left( \frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2} \exp \left[ -\frac{\ln 2 (\nu - \nu_0)^2}{(\Delta\nu_{0,D}/2)^2} \right], \quad (2.106)$$

a Dopplerova širina linije je [pri tome se podrazumijeva Maxswellova raspodjela čestica (atoma mase  $M$ ) po brzinama]:

$$\Delta\nu_{0,D} = 2\nu_0 \left( \frac{2k_B T}{Mc^2} \ln 2 \right)^{1/2}. \quad (2.107)$$

Dopplerovo širenje je naročito izraženo kod gasovitih aktivnih sredina, dok je kod čvrstih tijela ono malo jer su kod njih joni u aktivnoj sredini čvrsto vezani sa kristalnom rešetkom i mogu se u prvoj aproksimaciji smatrati nepokretnima. Na slici 2.8 su prikazane prirodno (Lorentzova forma) i Dopplerovski (Gaussova forma) proširene spektralne linije. Analogon jednačine (2.104), u slučaju Gaussove forme, su relacije:

$$\int_0^\infty g_G(\nu, \nu_0) d\nu = 1, \quad g_G^{\max} = g_G(\nu_0, \nu_0) = \frac{2}{\Delta\nu_0} \left( \frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2} \approx \frac{0.939}{\Delta\nu_0}. \quad (2.108)$$

Kod čvrstih aktivnih sredina značajan uzrok širenja linije su nehomogenosti kristala i oscilacije rešetke. Što je viša temperatura kristala, to su oscilacije veće. Joni se nalaze u promjenljivom polju koje mijenja položaj energetskih nivoa, i samim time, i širinu spektralne linije. Stepentoplotnog širenja je određen vezom jona sa kristalnom rešetkom. Pored ovih, postoje i drugi uzroci širenja linija, kao što su npr. efekti Zeemana i Starka. Pod djelovanjem vanjskog magnetnog i električnog polja dolazi do pomaka energetskih nivoa. Npr. energetski nivo  $E_m$  se pomjera za  $\Delta E_m$  i, do tada jedinstveni nivo, se pocijepa na nekoliko ( $g_m$ ) različitih podnivoa. Cijepanje energetskog nivoa (koje dovodi i do njegovog širenja) pod dejstvom magnetnog polja se naziva Zeemanov efekat, a broj  $g_m$  stepen degeneracije nivoa. Cijepanje i širenje nivoa pod djelovanjem električnog polja se naziva Starkov efekat. Kao i Dopplerovo širenje, i ova širenja linije su opisana Gaussovom raspodjelom. Razlog je to što bilo koji mehanizam koji izaziva slučajnu raspodjelu rezonantnih frekvencija atoma dovodi do širenja koje ima Gaussovu formu. Navedeni mehanizmi širenja linija često djeluju istovremeno.



## 2.9 Princip rada lasera

Proces stimulisane emisije se može opisati formulom:

$$(dN_2/dt)_{st} = -W_{21}N_2, \quad (2.109)$$

gdje je  $(dN_2/dt)_{st}$  brzina prelaza na račun stimulisane emisije. Vjerovatnoća stimulisane emisije  $W_{21}$ , za razliku od vjerovatnoće spontane emisije  $A$ , zavisi ne samo od konkretnog prelaza, već i od intenziteta upadnog elektromagnetnog talasa, tačnije:

$$W_{21} = \sigma_{21}F, \quad (2.110)$$

gdje je  $F$  gustoća fluksa fotona u upadnom talasu, a  $\sigma_{21}$  presjek za stimulisanu emisiju, koji zavisi samo od karaktera datog prelaza. Ako dimenziju dužine označimo sa  $L$ , a dimenziju vremena sa  $T$ , tada veličina  $\sigma_{21}$  ima dimenziju površine  $L^2$ ,  $F$  dimenzija  $1/(L^2T)$  (broj fotona koji u jedinici vremena prođu kroz jedinicu površine), a  $W_{21}$  dimenziju  $1/T$ .

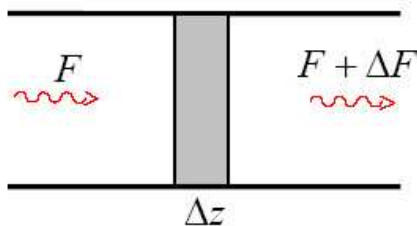
Vjerovatnoća apsorpcije  $W_{12}$  se definiše formulom:

$$dN_1/dt = -W_{12}N_1, \quad (2.111)$$

gdje je  $N_1$  naseljenost nivoa 1. I ovdje vrijedi relacija:

$$W_{12} = \sigma_{12}F, \quad (2.112)$$

gdje je  $\sigma_{12}$  presjek za apsorpciju. Einstein je pokazao da je  $\sigma_{12} = \sigma_{21} = \sigma$ , gdje je sa  $\sigma$  označen *presjek* datog prelaza  $1 \leftrightarrow 2$ .



Slika 2.9: Izmjena gustoće fluksa fotona  $\Delta F$  pri prolazu elektromagnetnog talasa kroz sloj debljine  $\Delta z$ .

Pretpostavimo da se u sredini sa dva izdvojena proizvoljna energetska nivoa, čije su naseljenosti  $N_1$  i  $N_2$ , prostire elektromagnetni talas u smjeru  $z$  ose. Izmjena gustoće fluksa fotona  $dF$ , uzrokovana procesima stimulisane emisije i apsorpcije u sloju debljine  $dz$  (vidjeti sliku 2.9), na osnovu jednačina (2.109)–(2.112), je određena formulom:

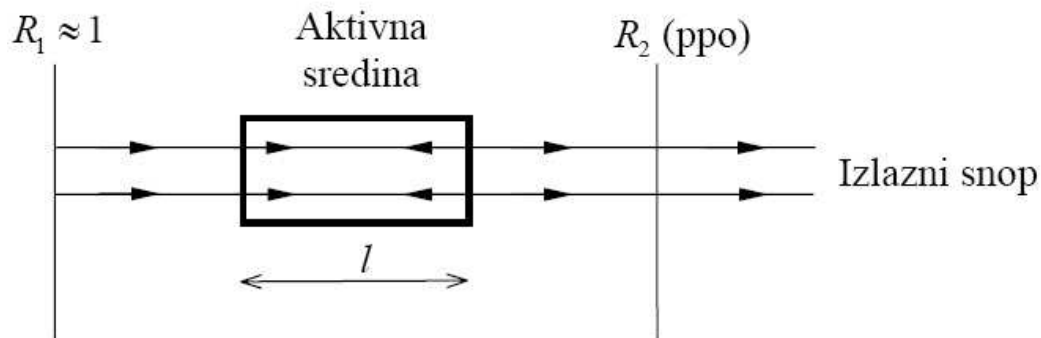
$$dF = \sigma F (N_2 - N_1) dz. \quad (2.113)$$

Ako je  $N_2 < N_1$ , tada je  $dF/dz < 0$  i sredina je apsorbujuća, a u slučaju kada je  $N_2 > N_1$  sredina je “pojačavajuća” (jer je  $dF/dz > 0$ ). Naseljenost nivoa u termodinamičkoj ravnoteži (indeks tdr) se opisuje Boltzmannovom statistikom:

$$(N_2/N_1)_{\text{tdr}} = \exp[-(E_2 - E_1)/(k_B T)]. \quad (2.114)$$

Dakle, u slučaju termodinamičke ravnoteže je  $N_2 < N_1$  (jer je  $T > 0$ ) i sredina apsorbuje zračenje frekvencije  $\nu$ . Međutim, ako na neki način uspijemo da ostvarimo neravnotežno stanje za koje je  $N_2 > N_1$ , tada će sredina djelovati kao pojačavač. U tom slučaju kažemo da imamo *inverziju naseljenosti* u sredini i takvu sredinu nazivamo *aktivna sredina*.

Da bi se pojačavač pretvorio u generator elektromagnetnog zračenja neophodno je ostvariti povratnu spregu. Kod masera se to postiže tako što se aktivna sredina postavlja u rezonator sa rezonantnom frekvencijom  $\nu$ , a kod lasera se aktivna sredina postavlja između dva ogledala (vidjeti sliku 2.10).



Slika 2.10: Šema lasera sa aktivnom sredinom, totalno reflektujućim ogledalom i polupropusnim ogledalom (ppo).

Ravni elektromagnetni talas koji se prostire u smjeru okomitom na ogledala će se naizmjenično reflektovati od njih, pojačavajući se pri svakom prolazu kroz aktivnu sredinu. Ako je jedno od ogledala djelomično propusno, tada se na izlazu iz sistema može izdvojiti snop korisnog zračenja. I kod masera i kod lasera generacija je moguća ako je zadovoljen neki granični uslov – prag generacije. Npr., kod lasera do generacije dolazi u slučaju kada pojačanje aktivne sredine kompenzira gubitke u njoj (u gubitke ubrajamo i “korisne gubitke” na račun izlaza zračenja kroz djelomično propusno ogledalo). Na osnovu jednačine (2.113), pojačanje zračenja za jedan prolaz u aktivnoj sredini dužine  $l$  (odnos izlazne i ulazne gustoće fluksa fotona) je  $\exp[\sigma(N_2 - N_1)l]$ . Ako sa  $R_1$  i  $R_2$  označimo koeficijente refleksije ogledala, tada su gubici  $R_1 R_2$  i prag generacije se dostiže ako je:

$$R_1 R_2 e^{2\sigma(N_2 - N_1)l} = 1, \quad (2.115)$$

tj. kada inverzija naseljenosti dostigne tzv. *kritičnu inverziju*:

$$(N_2 - N_1)_{\text{kr}} = -\frac{\ln(R_1 R_2)}{2\sigma l}. \quad (2.116)$$

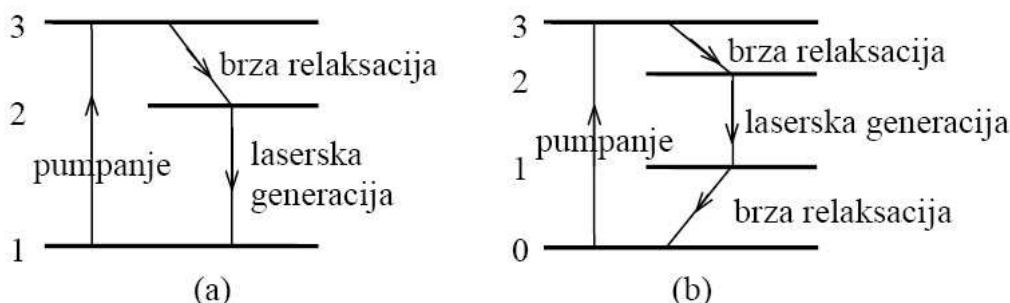
Tek kada je dostignuta kritična inverzija moguće je razlikovati generaciju od spontane emisije zračenja. Upravo opisani mehanizam čini osnovu generatora laserskog zračenja – lasera.

Razmotrimo sada kako se može postići inverzija naseljenosti. Na prvi pogled izgleda da se to može postići u sistemu sa dva nivoa i sa dovoljno jakim elektromagnetnim poljem frekvencije  $\nu$ . Pošto je u termodinamičkoj ravnoteži nivo 1 naseljeniji od nivoa 2, apsorpcija će prevladati stimulisanu emisiju, tj. biće više prelaza  $1 \rightarrow 2$  nego prelaza  $2 \rightarrow 1$ . Problem nastupa kada postane  $N_1 = N_2$ . Tada se procesi stimulisano zračenja i apsorpcije uzajamno kompenziraju i, u skladu sa (2.113), sredina postaje propusna za elektromagnetne talase frekvencije  $\nu$ . Tada se obično govori o *zasićenju* sistema sa *dva nivoa*.

Dakle, koristeći samo dva nivoa nije moguće ostvariti inverziju naseljenosti. Postavlja se pitanje da li se to može sa tri ili više nivoa. Pokazuje se da može, i, u zavisnosti od broja “radnih” nivoa iz (neograničenog) skupa stanja atomskog sistema, govori se o sistemu sa 3, 4 i više nivoa. Kod laserskog sistema sa *tri nivoa* atomi se prvo prevode sa osnovnog nivoa 1 na nivo 3 [vidjeti sliku 2.11(a)]. Ako je izabrana takva sredina u kojoj atom, kada se nađe na nivou 3, brzo prelazi na nivo 2, tada se u takvoj sredini može ostvariti inverzija naseljenosti između nivoa 2 i 1.

Kod laserskog sistema sa *četiri nivoa* atomi se također prevode sa osnovnog nivoa (označimo ga sada kao nulti nivo) na nivo 3. Ako nakon toga atomi brzo prelaze na nivo 2, tada će se između nivoa 2 i 1 pojaviti inverzija naseljenosti. Kada kod takvog lasera sa četiri nivoa dođe do generacije, atomi pri procesu stimulisane emisije prelaze sa nivoa 2 na nivo 1. Zato je, za neprekidni rad lasera sa četiri nivoa, neophodno da čestice koje se nađu na nivou 1 vrlo brzo prelaze na nulti nivo. Inverziju naseljenosti je lakše postići kod lasera sa četiri nivoa. Pošto je obično  $E_2 - E_1 \gg k_B T$ , u skladu sa Boltzmannovom statistikom [vidjeti formulu (2.114)] gotovo svi atomi se pri termodinamičkoj ravnoteži nalaze u osnovnom stanju. Zato je kod sistema sa tri nivoa potrebno prevesti više od polovine atoma sa osnovnog nivoa 1 preko nivoa 3 na nivo 2, da bi nastala inverzija naseljenosti. Za razliku od toga, kod lasera sa četiri nivoa, nivo 1 je nenaseljen i inverzija naseljenosti se može postići i ako se samo jedan atom prevede na nivo 2 (prolazeći nivo 3). To je znatno jednostavnije i zato je bolje tražiti takve aktivne sredine koje rade po šemi četiri ili više nivoa.

Proces prelaska atoma sa nivoa 1 (0) na nivo 3 naziva se *pumpanjem* sis-



Slika 2.11: Šema laserskog sistema sa tri (a) i četiri (b) nivoa.

tema sa tri (četiri) nivoa. Pumpanje se može vršiti pomoću lampi ili pomoću električnog pražnjenja. Brzina kojom se uslijed pumpanja naseljava laserski nivo 2 je:

$$(dN_2/dt)_p = W_p N_g, \quad (2.117)$$

gdje je  $N_g$  naseljenost osnovnog nivoa (engleski: *ground*=osnova), a  $W_p$  brzina pumpanja. Prag generacije se postiže kada je brzina pumpanja veća od neke kritične brzine  $W_{kr}$ .

## 2.10 Zadaci

**Zadatak.** Izračunati Einsteinov koeficijent za spontanu emisiju  $A_{21}$  za prelaz  $2P \rightarrow 1S$  u atomu vodonika.

*Rješenje:* U kvantnoj mehanici se stanja atoma vodonika opisuju talasnim funkcijama  $\Psi_{nlm}$ , koje su karakterisane sa glavnim kvantnim brojem  $n = 1, 2, \dots, \infty$  koji određuje energiju atoma:  $E_n = -Ry/n^2$  [ $1 \text{ Ry} = 13,605\,6981(40) \text{ eV}$ ], orbitalnim kvantnim brojem  $l$  koji poprima vrijednosti  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$  i magnetnim kvantnim brojem  $m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ . Ovi kvantni brojevi su na odgovarajući način povezani sa spektroskopskim oznakama  $1S, 2S, 2P, \dots$ , gdje prvi broj u oznaci odgovara glavnom kvantnom broju, a velika latinična slova odgovaraju orbitalnom kvantnom broju  $l$  po šemi:  $l = \{0, 1, 2, 3, 4, \dots\} \leftrightarrow \{S, P, D, F, G, \dots\}$ . U našem zadatku osnovno stanje ( $1S \rightarrow n = 1, l = 0$ ) je nedegenerisano ( $g_1 = 1$ ) i odgovara mu talasna funkcija (u sfernim koordinatama):

$$\Psi_{1S} = \Psi_{100}(r, \theta, \varphi) = (\pi a_B^3)^{-1/2} e^{-r/a_B}, \quad (2.118)$$

gdje je:

$$a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\epsilon_0\hbar^2}{\pi m_e e^2}$$

Bohrov radijus. Stanje 2P ( $n = 2, l = 1, m = -1, 0, 1$ ) je trostruko degenerisano ( $g_2 = 3$ ). Valne funkcije su:

$$\begin{aligned}\Psi_{210}(r, \theta, \varphi) &= (32\pi a_B^5)^{-1/2} r e^{-\frac{r}{2a_B}} \cos \theta, \\ \Psi_{211}(r, \theta, \varphi) &= (32\pi a_B^5)^{-1/2} r e^{-\frac{r}{2a_B}} \sin \theta \cos \varphi, \\ \Psi_{21-1}(r, \theta, \varphi) &= (32\pi a_B^5)^{-1/2} r e^{-\frac{r}{2a_B}} \sin \theta \sin \varphi.\end{aligned}\quad (2.119)$$

Funkcije stanja su normirane na jedinicu:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty r^2 dr |\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 = 1.$$

Frekvencija koja odgovara spontanoj emisiji pri prelazu 2P  $\rightarrow$  1S je, na osnovu jednačina:

$$h\nu_{nm} = E_n - E_m, \quad E_n = -\frac{1}{2n^2} \frac{\hbar^2}{m_e a_B^2},$$

data sa:

$$\nu_0 = \nu_{21} = \frac{E_2 - E_1}{h} = \frac{h \left(-\frac{1}{4} + 1\right)}{8\pi^2 m_e a_B^2} = \frac{3h}{32\pi^2 m_e a_B^2} = 2,46738 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}.\quad (2.120)$$

Na osnovu formule:

$$A_{nm} = \frac{16\pi^3}{3\varepsilon_0 h c^3} \frac{g_m}{g_n} \mu_{mn}^2 n \nu_0^3,$$

traženi Einsteinov koeficijent, uzimajući u obzir da je indeks prelamanja sredine  $n = 1$ , i da je  $g_m = g_1 = 1$  i  $g_n = g_2 = 3$ , je dat sa:

$$A_{21} = \frac{16\pi^3}{9\varepsilon_0 h c^3} \mu_{12}^2 \nu_0^3.\quad (2.121)$$

U jednačini (2.121)  $\mu_{12}$  je modul matičnog elementa električnog dipolnog momenta:

$$\boldsymbol{\mu}_{12} = \int d\mathbf{r} \Psi_{1S}^* \mathbf{e} \mathbf{r} \Psi_{2P}, \quad \mu_{12} = (\mu_{12,x}^2 + \mu_{12,y}^2 + \mu_{12,z}^2)^{1/2}.$$

Za stanje  $\Psi_{210}$  je:

$$\begin{pmatrix} \mu_{12,x} \\ \mu_{12,y} \\ \mu_{12,z} \end{pmatrix} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty r^2 dr \frac{e^{-r/a_B}}{\sqrt{\pi a_B^3}} \begin{pmatrix} er \sin \theta \cos \varphi \\ er \sin \theta \sin \varphi \\ er \cos \theta \end{pmatrix} \frac{r e^{-\frac{r}{2a_B}} \cos \theta}{\sqrt{32\pi a_B^5}}.$$

Pošto je:  $\int_0^{2\pi} d\varphi \cos \varphi = \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \varphi = 0$ ,  $\int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi$ , to je:

$$\mu_{12} = \mu_{12,z} = \frac{2\pi e}{\sqrt{32\pi^2 a_B^8}} e \underbrace{\int_0^\infty dr r^4 e^{-\frac{3r}{2a_B}}}_{4! [3/(2a_B)]^{-5}} \underbrace{\int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos^2 \theta}_{2/3} = \frac{2^{15/2}}{3^5} e a_B.\quad (2.122)$$

Isti rezultat se može dobiti i za ostala dva stanja 2P, tako da je Einsteinov koeficijent za prelaz iz 2P stanja (210), (211) i (21-1) u 1S stanje (100) tri puta veći od onoga datog sa (2.121) uz (2.120) i (2.122), tj.:

$$A_{2P \rightarrow 1S} = 3A_{21} = 3 \frac{2^4 \pi^3}{3^2 \varepsilon_0 h c^3} \frac{2^{15}}{3^{10}} e^2 a_B^2 \frac{3^3 h^3}{2^{15} \pi^6 m_e^3 a_B^6} = \frac{2^4}{3^8 \pi^3} \frac{h^2 e^2}{\varepsilon_0 c^3 m_e^3 a_B^4} = 6,277 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}.$$

Vrijeme života 2P stanja je:  $\tau_{sp} = 1/A_{2P \rightarrow 1S} = 1,593 \cdot 10^{-9} \text{ s}$ .

# Poglavlje 3

## Spin

U prethodnim razmatranjima smo često spominjali spin elektrona. U ovom poglavlju diskutovat ćemo eksperimentalne dokaze postojanja spina. Također ćemo razviti matematički formalizam pomoću kojega se opisuje spin.

Kao i Paulijev princip, spin je fenomen koji se najprije pojavio u kvantnoj mehanici i koji nema analogije u klasičnoj fizici. Elektron je bio prva elementarna čestica čiji je spin detektovan. Nekoliko eksperimenata, koji nisu mogli biti interpretirani klasično, je motivisalo Goudsmita i Uhlenbecka 1925. godine da postave slijedeću hipotezu:

*Svaki elektron ima unutrašnji ugaoni moment (spin) jednak  $\hbar/2$ , koji odgovara magnetnom momentu jednog Bohrovog magnetona  $\mu_B = e\hbar/(2m)$ .*

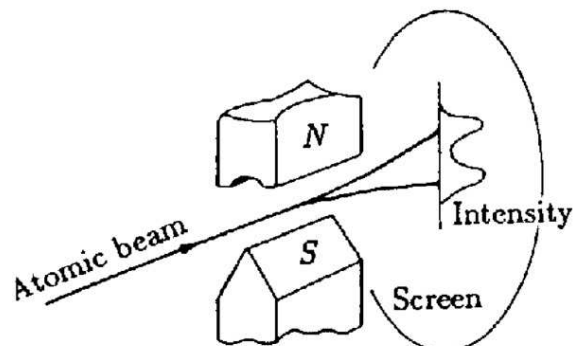
Razmotrit ćemo sada tri eksperimenta povezana sa otkrićem spina.

### 3.1 Stern-Gerlachov eksperiment

Stern-Gerlachov eksperiment iz 1922. godine predstavlja primjer kvantizacije ugaonog momenta. Na slici 3.1 je predstavljena šema Stern-Gerlachov eksperimenta. Snop atoma srebra prolazi kroz nehomogeno magnetno polje koje generiše magnet sa polovima N i S. Atomi su u osnovnom stanju, što implicira da su elektroni u stanju  $1s$ , tako da im je orbitalni ugaoni moment jednak nuli. Zbog toga atomi ne bi trebali imati nikakav magnetni moment. Međutim, u eksperimentu je zapaženo cijepanje snopa na dvije komponente. Ovo cijepanje je uzrokovano silom:

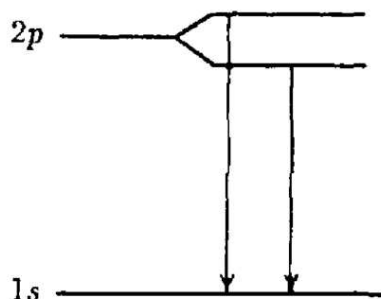
$$\mathbf{F} = -\nabla(-\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}) = \nabla(\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}) = (\mathbf{M} \cdot \nabla)\mathbf{B}, \quad (3.1)$$

koja djeluje na magnetni moment  $\mathbf{M}$  u nehomogenom magnetnom polju  $\mathbf{B}$ . To ukazuje na to da bi elektron trebao imati unutrašnji magnetni moment.



Slika 3.1: Stern-Gerlachov eksperiment.

Zbog toga što je snop podijeljen na komponente istog intenziteta, slijedi da svi elektroni imaju magnetni moment iste apsolutne vrijednosti. Također, postoje dvije moguće orijentacije - paralelna i antiparalelna magnetnom polju.<sup>1</sup>



Slika 3.2: Cijepanje dubleta spektralnih linija.

## 3.2 Cijepanje spektralnih linija

Dokaz da elektron ima spin je i postojanje multipletne strukture atomskog spektra. Uzmimo npr. dubletno cijepanje linije natrijuma. Natrijum ima

<sup>1</sup>U principu, također je moguće da magnetni moment potiče iz jezgra atoma. Kasnije ćemo vidjeti da je odnos magnetnog momenta jezgra prema Bohrovom magnetonu približno jednak odnosu masa  $m_{\text{elektron}}/m_{\text{proton}} \ll 1$ . I zaista, pažljivija analiza Stern-Gerlachovog eksperimenta otkriva finu strukturu linija uzrokovanih magnetnim momentima jezgara.



jedan valentni elektron. Pri prelazu atoma Na iz prvog pobuđenog stanja u osnovno stanje ( $2p \rightarrow 1s$ ) pojavljuju se dvije međusobno bliske spektralne linije na 589,0 nm i 589,6 nm.  $2p$  nivo je trostruko degenerisan ( $m = 0, \pm 1$ ). Ova degeneracija se može ukloniti djelovanjem vanjskog magnetnog polja. Međutim, dubletno cijepanje se opaža i bez postojanja tog polja. Ovo se može objasniti ako se pretpostavi da elektron ima spin na slijedeći način.

Orbitalno kretanje elektrona stvara magnetno polje. Unutrašnji magnetni moment, koji je posljedica spina, orijentiše se tako da, analogno kao kod Stern-Gerlachovog eksperimenta, djeluje sila koja dovodi do cijepanja na dvije različite linije u energetsom spektru atoma. Ovo spinom uzrokovano cijepanje spektralnih linija je zapaženo kod svih atoma i naziva se *multipletna struktura*.

Klasični magnetni moment uzrokovan orbitalnim kretanjem je dat formulom

$$\mathbf{M} = \frac{q}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{v} = \frac{q}{2m} \mathbf{L}, \quad (3.2)$$

gdje je  $q$  naboj,  $\mathbf{v}$  brzina,  $m$  masa, a  $\mathbf{L}$  orbitalni ugaoni moment čestice.  $z$  komponenta orbitalnog ugaonog momenta je kvantizirana:

$$m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l, \quad (3.3)$$

tako da očekujemo da vrijedi  $M_z = \mu_B m_l$ , gdje je

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m} \quad (3.4)$$

Bohrov magneton. Dakle, amplituda  $|\mathbf{M}|$  vektora magnetnog momenta elektrona uzrokovanog orbitalnim kretanjem, koja se može odrediti eksperimentalno, jednaka je višekratniku Bohrovog magnetona.

Za svaki ugaoni moment  $l\hbar$  postoji  $2l + 1$  mogućnosti za podešavanje vrijednosti magnetnog momenta. U slučaju spinskog momenta pojavljuju se samo dvije orijentacije, tako da zaključujemo da je komponenta spina paralelna polju jednaka jednoj polovini vrijednosti Planckove konstante:

$$S_z = \frac{1}{2}\hbar \quad \text{i} \quad S_z = -\frac{1}{2}\hbar. \quad (3.5)$$

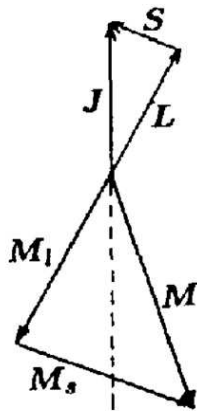
Kako iz  $2l_s + 1 = 2$  slijedi  $l_s = 1/2$ , jasno je da je spin elektrona  $\hbar/2$ . Ovo objašnjava kako dvije opažene orijentacije u Stern-Gerlachovom eksperimentu, tako i dubletno cijepanje.

Dakle, spin elektrona, za razliku od orbitalnog ugaonog momenta, je polucijeli. Orbitalnom ugaonom momentu  $l\hbar$  odgovara maksimalni magnetni moment  $l\mu_B$ . Pošto je spin elektrona  $\hbar/2$ , očekujemo da je spinski magnetni

moment  $\mu_B/2$ . Međutim, eksperimenti su pokazali da je odgovarajući magnetni moment  $\mu_B$ . Da bismo ovo razjasnili, uvedimo novi faktor  $g$  tako da veza između ugaonog momenta i magnetnog momenta, u opštem slučaju, definišemo pomoću relacije:

$$\mathbf{M} = g \frac{q}{2m} \mathbf{J}, \quad (3.6)$$

gdje  $\mathbf{J}$  označava orbitalni ugaoni moment ili spin a  $q$  je naboj čestice. Veličina  $g$  se naziva žiromagnetni faktor ili  $g$  faktor. Za orbitalni ugaoni moment je  $g = 1$ . Međutim, za spin je  $g = 2$ . Kako je elektron negativno naelektrisan,  $q = -e$ , njegov magnetni moment je uvijek antiparalelan ugaonom momentu. Ako kombinujemo ugaoni moment  $\mathbf{L}$  i spin  $\mathbf{S}$  u ukupni ugaoni moment  $\mathbf{J}$ , zbog razlike žiromagnetnih faktora, rezultujući ukupni magnetni moment  $\mathbf{M}$  nije paralelan tom ugaonom momentu. Ukupni magnetni moment  $\mathbf{M}$  vrši precesiju oko ukupnog ugaonog momenta  $\mathbf{J}$ , tako da, nakon usrednjavanja tokom vremena, ostaje samo komponenta u smjeru  $\mathbf{J}$ .

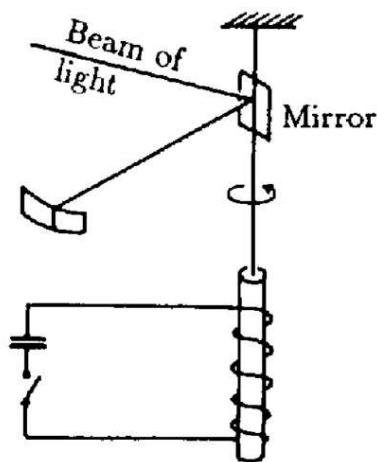


Slika 3.3: Sume orbitalnog  $\mathbf{L}$  i spinskog  $\mathbf{S}$  ugaonog momenta i njima odgovarajućih magnetnih momenata  $\mathbf{M}_l$  i  $\mathbf{M}_s$ . Rezultujući totalni magnetni moment  $\mathbf{M}$  nije kolinearan sa totalnim ugaonim momentom  $\mathbf{J}$  zato što je spinski  $g$ -faktor  $g = 2$ . To dovodi do precesije  $\mathbf{M}$  oko  $\mathbf{J}$ .

U slučaju atomskih jezgara, “nuklearni magneton” se često koristi kao jedinica za magnetni moment. Razlikuje se od Bohrovog magnetona po tome što se masa elektrona u nazivniku (3.4) zamjenjuje sa masom protona. Zbog toga su nuklearni magnetni momenti približno za tri reda veličine manji od elektronskih. Međudjelovanje između nuklearnog i elektronskog momenta je uzrok pojave tzv. *hiperfine strukture spektra*.

### 3.3 Einstein-de Haas eksperiment

Ako je željezna šipka namagnetisana, tada se elementarni magnetni momenti, kao i elementarni ugaoni momenti koji ih uzrokuju, mijenjaju i postaju orijentisani. Zbog sačuvanja ugaonog momenta, željezna šipka kao cjelina mijenja svoj makroskopski ugaoni moment. Imajući to u vidu, žiromagnetni odnos se može odrediti iz magnetizacije i ugaonog momenta šipke.



Slika 3.4: Šema Einstein-de Haasovog eksperimenta.

Na bazi ove ideje Einstein i de Haas su 1915. godine izveli eksperiment u kojem su izmjerili žiromagnetni odnos. Željezna šipka je okačena o nit na takav način da može rotirati oko svoje ose. Zbog torzionih vibracija žice može se izmjeriti ugaoni moment  $\mathbf{L}$  koji šipka dobija kada je namagnetisana. Pretpostavimo da  $N$  elektrona sa njihovim elementarnim ugaonim momentom  $\mathbf{j}$  doprinosi magnetizaciji. Tada je

$$N\mathbf{j} + \mathbf{L} = \mathbf{0} \quad (3.7)$$

i, prema tome, za magnetizaciju vrijedi:

$$\mathbf{M}_{\text{šipke}} = N\mathbf{M}_{\text{elektrona}} = Ng \frac{-|e|\hbar}{2m} \mathbf{j} = g \frac{|e|\hbar}{2m} \mathbf{L} = g \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}. \quad (3.8)$$

Mjereći makroskopske veličine  $\mathbf{L}$  i  $\mathbf{M}$  može se odrediti žiromagnetni odnos  $g$  elementarnih magnetnih momenata i ugaonog momenta koji ih uzrokuje.  $\mathbf{L}$  je mjereno pomoću skretanja svjetlosnog zraka, a  $\mathbf{M}$  šipke je određeno pomoću preostalog magnetizma (nakon prethodnog kalibrisanja instrumenta). U Einstein-de Haasovom eksperimenta, dobijen je magnetni moment  $2\mu_B$ , tako da je zaključeno da je  $g = 2$ . Napomenimo da ovaj rezultat isključuje orbitalni ugaoni moment kao izvor feromagnetizma.

### 3.4 Matematički opis spina

Pošto je spin ugaoni moment njegov matematički opis je analogan formalizmu orbitalnog ugaonog momenta sa kojim smo se ranije upoznali. Spin je polucijeli i može se orijentisati na dva načina, što ima za posljedicu neke specifičnosti matematičkog formalizma koji ćemo razmotriti u ovom odjeljku.

Operator (vektora) spina kao ugaonog momenta ima tri komponente:  $\hat{S} = \{\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z\}$ . Karakteristično obilježje operatora ugaonog momenta su komutacione relacije koje zadovoljavaju komponente tog vektora. Zato zahtijevamo da za  $\hat{S}_x$ ,  $\hat{S}_y$  i  $\hat{S}_z$  vrijede iste komutacione relacije kao i za operatore  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  i  $\hat{L}_z$  orbitalnog ugaonog momenta. Ovo je manifestacija spina kao ugaonog momenta. Dakle, vrijedi:

$$\begin{aligned}\hat{S}_x\hat{S}_y - \hat{S}_y\hat{S}_x &= i\hbar\hat{S}_z, \\ \hat{S}_y\hat{S}_z - \hat{S}_z\hat{S}_y &= i\hbar\hat{S}_x, \\ \hat{S}_z\hat{S}_x - \hat{S}_x\hat{S}_z &= i\hbar\hat{S}_y,\end{aligned}\tag{3.9}$$

odnosno, ako uvedemo skraćene oznake  $\{\hat{S}_1, \hat{S}_2, \hat{S}_3\} \equiv \{\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z\}$ ,

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j]_- = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k,\tag{3.10}$$

gdje je  $\varepsilon_{ijk}$  potpuno antisimetrični (trodimenzionalni) tenzor, tj.

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{ako su } i, j, k \text{ parna permutacija } 1, 2, 3 \\ -1 & \text{ako su } i, j, k \text{ neparna permutacije } 1, 2, 3 \\ 0 & \text{ako su dva ili tri indeksa jednaka.} \end{cases}\tag{3.11}$$

Dalje, operatori  $\hat{S}_i$  trebaju biti hermitski, tj.  $\hat{S}_i = \hat{S}_i^\dagger$ , da bi njihove očekivane vrijednosti bile realne.

Za predstavljanje operatora  $\hat{S}_i$ , uobičajeno je koristiti *Paulijeve matrice*  $\hat{\sigma}_i$ . Da bismo isključili faktor  $\hbar/2$  iz jednačina, definišemo ih na sljedeći način:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z.\tag{3.12}$$

U tom slučaju, komutacione relacije (3.9) poprimaju slijedeći oblik:

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x &= 2i\hat{\sigma}_z, \\ \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y &= 2i\hat{\sigma}_x, \\ \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x - \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z &= 2i\hat{\sigma}_y,\end{aligned}\tag{3.13}$$

ili, u kompaktnijoj formi:

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j - \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i = 2i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k.\tag{3.14}$$

Komponente spina mogu imati samo dvije različite orijentacije kojima odgovaraju dvije vlastite vrijednosti:  $\pm\hbar/2$ . S druge strane, znamo da  $2 \times 2$  matrice imaju tačno dvije vlastite vrijednosti. Dakle, spinske matrice moraju biti  $2 \times 2$  matrice. Dalje, uzimamo  $z$ -smjer za "smjer kvantizacije". Tada je  $z$  osa za koju vezujemo orijentaciju spina. Matematički, ovo znači da su spinske funkcije date kao vlastite funkcije matrice  $\hat{\sigma}_z$ .

Matrica  $\hat{\sigma}_z$  je dijagonalna u svojoj vlastitoj reprezentaciji i ima vlastite vrijednosti  $\pm 1$  kao dijagonalne elemente:

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{i} \quad \hat{\sigma}_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{\mathbb{I}}. \quad (3.15)$$

Za matrice  $\hat{\sigma}_x$  i  $\hat{\sigma}_y$  analogne relacije vrijede u njihovim vlastitim reprezentacijama. S obzirom da jedinična matrica ostaje nepromijenjena pri promjeni reprezentacije, to, u opštem slučaju, vrijedi:

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{\mathbb{I}}. \quad (3.16)$$

Da bismo dobili matrice  $\hat{\sigma}_x$  i  $\hat{\sigma}_y$  u vlastitoj reprezentaciji od  $\hat{\sigma}_z$ , polazimo od komutacionih relacija (3.13). Množenjem druge jednakosti slijeva i zdesna sa  $\hat{\sigma}_y$ , sabirajući dobijene relacije nalazimo da je:

$$2i(\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x) = (\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y)\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y) = \hat{\sigma}_y^2\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y^2 = 0, \quad (3.17)$$

pri čemu smo također uzeli u obzir relaciju (3.16). Ovo znači da, nezavisno od reprezentacije, vrijedi:

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = 0. \quad (3.18)$$

Analogne relacije vrijede i za ostale komponente.

Paulijeve matrice su *antikomutirajuće*. Ove relacije se također mogu napisati i u slijedećem obliku:

$$\{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\} = \{\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\} = \{\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x\} = 0, \quad (3.19)$$

gdje je oznaka antikomutatora  $\{, \} \equiv [, ]_+$ . Relacije (3.16) i (3.19) se mogu kombinovati u kompaktniju formu:

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i = 2\delta_{ij}. \quad (3.20)$$

Da bismo izračunali eksplicitno matrice  $\hat{\sigma}_x$  i  $\hat{\sigma}_y$  napišimo ih u obliku:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Iz antikomutacionih relacija (3.19) za  $\hat{\sigma}_x$  i  $\hat{\sigma}_z$  dobijamo:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & -a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

tako da je  $a_{11} = a_{22} = 0$  i

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Pošto matrice moraju biti hermitske, to je  $\hat{\sigma}_x = \hat{\sigma}_x^\dagger = \hat{\sigma}_x^*$ , odakle slijedi da je

$$a_{21} = a_{12}^*, \quad (3.24)$$

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{12}^* & 0 \end{pmatrix} \quad \text{i} \quad \hat{\sigma}_x^2 = \begin{pmatrix} |a_{12}|^2 & 0 \\ 0 & |a_{12}|^2 \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

Na osnovu (3.16) matrica  $\hat{\sigma}_x^2$  mora bit jednaka  $\hat{\mathbb{I}}$ , tako da je

$$|a_{12}|^2 = 1. \quad (3.26)$$

Prikladan način zapisivanja matricnog elementa je  $e^{i\alpha}$ , gdje je  $\alpha$  realan broj. Matricu  $\hat{\sigma}_y$  možemo naći na analogan način. Napisat ćemo naše matrice u formi:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Primjenjujući antikomutacionu relaciju (3.20) na  $\hat{\sigma}_x$  i  $\hat{\sigma}_y$ , dobijamo:

$$\begin{pmatrix} e^{i(\alpha-\beta)} & 0 \\ 0 & e^{-i(\alpha-\beta)} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha-\beta)} & 0 \\ 0 & e^{i(\alpha-\beta)} \end{pmatrix}, \quad (3.28)$$

odakle je

$$e^{i(\alpha-\beta)} = -e^{-i(\alpha-\beta)} \Rightarrow e^{2i(\alpha-\beta)} = -1 \Rightarrow \alpha - \beta = \pi/2. \quad (3.29)$$

Ako je zadovoljena ova zadnja relacija sve gore navedene relacije će također vrijediti. Prema tome, možemo staviti da je:

$$\alpha = 0, \quad \beta = -\pi/2 \quad (3.30)$$

i dobiti slijedeće izraze za Paulijeve matrice u  $\hat{\sigma}_z$  reprezentaciji:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

Jedinična matrica zajedno sa Paulijevim matricama daje četiri linearno nezavisne matrice, koje se mogu uzeti kao baza u prostoru dvodimenzionalnih matrica. Ove matrice su također pogodne za opis drugih fizikalnih veličina koje se pojavljuju u samo dva stanja. Paulijeve matrice se koriste i pri izučavanju izospina, kojim opisujemo stanja nukleona.

Ukupni spin je:

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2) = \frac{3}{4} \hbar^2 \hat{\mathbb{I}} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 \hat{\mathbb{I}}, \quad (3.32)$$

što je analogno rezultatu koji smo dobili kada smo proučavali orbitalni ugaoni moment. Iz komutacionih relacija (3.9), također slijedi da je:

$$[\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_i]_- = 0, \quad (3.33)$$

tj. svaka komponenta spina komutira sa kvadratom totalnog spina. Naravno, ovo također slijedi iz relacija (3.31) i (3.32), jer jedinična matrica komutira sa svakom drugom matricom. S obzirom da je  $\hat{\mathbf{S}}^2$  proporcionalno sa jediničnom matricom, jednačina (3.33) vrijedi za svaki  $i$ .

## 3.5 Talasne funkcije sa spinom

Spin predstavlja novi stepen slobode čestice. Da bismo ga opisali uvodimo komponentu spina  $S_z$  u smjeru  $z$  ose kao dodatni argument talasne funkcije u koordinatnoj reprezentaciji:

$$\psi = \psi(\mathbf{r}, S_z, t), \quad (3.34)$$

Komponenta  $S_z$  poprima samo dvije vrijednosti,  $\pm\hbar/2$ , tako da je pogodno označiti talasne funkcije sa spinom kao vektor-kolonu sa dvije komponente. Takav zapis, dakle te vektore kolone sa dvije komponente zovemo *spinori*. Ovo je u skladu sa tim da su spinski operatori  $\hat{S}_i$  predstavljeni sa  $2 \times 2$  matricama. Dvije komponente spinora su:

$$\psi_1(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, +\hbar/2, t), \quad \psi_2(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, -\hbar/2, t), \quad (3.35)$$

dok je totalna talasna funkcija:

$$\Psi \equiv \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \psi_1(\mathbf{r}, t)\chi_+ + \psi_2(\mathbf{r}, t)\chi_- = \psi_1(\mathbf{r}, t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2(\mathbf{r}, t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.36)$$

Funkcije  $\chi_{\pm}$  označavaju samo stanje spina, tj. “spin gore” (“spin up”) ili “spin dole” (“spin down”).  $|\psi_1|^2$  je očigledno vjerovatnoća nalaženja

elektrona sa spinom gore na mjestu  $\mathbf{r}$  u trenutku  $t$ . Analogno,  $|\psi_2|^2$  je vjerovatnoća nalaženja elektrona sa spinom dole na mjestu  $\mathbf{r}$  u trenutku  $t$ . Ukupna vjerovatnoća nalaženja elektrona nezavisno od smjera njegovog spina mora biti jednaka jedinici, tako da je:

$$\int (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) dV = \int (\psi_1^* \ \psi_2^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} dV = \int \Psi^\dagger \Psi dV = 1. \quad (3.37)$$

Spinorska notacija daje jasnu sliku kako spinski operatori, napisani kao Paulijeve matrice, djeluju na spinore. Za vlastita stanja operatora  $\hat{\sigma}_z$  vrijedi:

$$\hat{\sigma}_z \begin{pmatrix} \psi_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ 0 \end{pmatrix} = (+1) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.38)$$

$$\hat{\sigma}_z \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = (-1) \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (3.39)$$

Spinorske funkcije  $\chi_\pm$  su *jedinični spinori*:

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{i} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

Također, vrijedi:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \psi_1 \chi_+, \quad \text{i} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \psi_2 \chi_-. \quad (3.41)$$

Jedinični spinori su vlastite funkcije operatora spina  $\hat{\sigma}_z$  sa vlastitim vrijednostima  $+1$  i  $-1$ :

$$\hat{\sigma}_z \chi_+ = (+1) \chi_+, \quad \hat{\sigma}_z \chi_- = (-1) \chi_-. \quad (3.42)$$

Napišimo proizvoljni spinski operator u obliku:

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

Ako koristimo matričnu reprezentaciju, operator djeluje na spinsku funkciju množenjem matricom:

$$\Phi = \hat{S} \Psi, \quad \text{gdje je} \quad \Phi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad \text{i} \quad \Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

U detaljnijem obliku, gornja relacija izgleda ovako:

$$\begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}\psi_1 + S_{12}\psi_2 \\ S_{21}\psi_1 + S_{22}\psi_2 \end{pmatrix}, \quad (3.45)$$



odnosno, napisano preko komponenti:

$$\varphi_1 = S_{11}\psi_1 + S_{12}\psi_2, \quad \varphi_2 = S_{21}\psi_1 + S_{22}\psi_2. \quad (3.46)$$

Srednja vrijednost operatora se definiše pomoću relacije:

$$\langle \hat{S} \rangle = \int \Psi^\dagger \hat{S} \Psi dV. \quad (3.47)$$

Ako su talasne funkcije spinori, moramo koristiti hermitski adjungirane talasne funkcije (umjesto kompleksno konjugiranih), tj.

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}^\dagger = ( \psi_1^* \quad \psi_2^* ). \quad (3.48)$$

Tada se srednja vrijednost lako računa kao:

$$\langle \hat{S}(t) \rangle = \int \langle \hat{S}(\mathbf{r}, t) \rangle dV = \int \Psi^\dagger \hat{S}(\mathbf{r}, t) \Psi dV, \quad (3.49)$$

gdje je:

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}(\mathbf{r}, t) \rangle &= \Psi^\dagger \hat{S} \Psi = ( \psi_1^* \quad \psi_2^* ) \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \\ &= \psi_1^* S_{11} \psi_1 + \psi_1^* S_{12} \psi_2 + \psi_2^* S_{21} \psi_1 + \psi_2^* S_{22} \psi_2. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Ovdje je  $\langle \hat{S}(\mathbf{r}, t) \rangle$  srednja vrijednost spinskog operatora (usrednjena po smjerovima spina) na mjestu  $\mathbf{r}$  i u trenutku  $t$ . S druge strane,  $\langle \hat{S}(t) \rangle$  je usrednjeno po smjerovima spina i po prostornim koordinatama u trenutku  $t$ .

Primijenimo sada gornje rezultate da izračunamo srednju vrijednost Paulijevih matrica po obadva moguća spinska stanja. Za  $x$  komponentu imamo:

$$\langle \hat{\sigma}_x(\mathbf{r}, t) \rangle = \Psi^\dagger \hat{\sigma}_x \Psi = ( \psi_1^* \quad \psi_2^* ) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1. \quad (3.51)$$

Na analogan način za  $y$  i  $z$  komponente dobijamo:

$$\langle \hat{\sigma}_y \rangle = ( \psi_1^* \quad \psi_2^* ) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = -i\psi_1^* \psi_2 + i\psi_2^* \psi_1, \quad (3.52)$$

$$\langle \hat{\sigma}_z \rangle = ( \psi_1^* \quad \psi_2^* ) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \psi_1^* \psi_1 - \psi_2^* \psi_2. \quad (3.53)$$

### 3.6 Interakcija sa elektromagnetnim poljem

Na naelektrisanu česticu sa nabojem  $q$  koja se kreće u elektromagnetnom polju djeluje Lorentzova sila

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (3.54)$$

Jačine električnog i magnetnog polja se mogu izraziti preko elektromagnetnih potencijala  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  i  $\phi(\mathbf{r}, t)$  pomoću relacija

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (3.55)$$

Ovdje je  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  vektorski potencijal, a  $\phi(\mathbf{r}, t)$  Coulombov potencijal. U klasičnoj mehanici ovo kretanje se opisuje Hamiltonovom funkcijom

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi, \quad (3.56)$$

pri čemu je interakcija čestice sa elektromagnetnim poljem uvedena pomoću tzv. zamjene minimalne veze (eng. "minimal coupling"; ova zamjena je gauge invarijantna):  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}$ . Kanonski impuls  $\mathbf{p}$  (u Hamiltonovom formalizmu) je suma kinetičkog impulsa  $m\mathbf{v}$  i člana  $q\mathbf{A}$  koji je određen vektorskim potencijalom  $\mathbf{A}$ :

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}. \quad (3.57)$$

Prelaz na kvantnu mehaniku se vrši zamjenom kanonskog impulsa  $\mathbf{p}$  sa operatorom  $-i\hbar\nabla$ , prema pravilima kvantiziranja u koordinatnoj reprezentaciji. Kao rezultat dobijamo hamiltonijan:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2 + q\phi. \quad (3.58)$$

Kvadriranjem, uzimajući u obzir da operator  $\nabla$  i vektorski potencijal u opštem slučaju ne komutiraju, nalazimo da je:<sup>2</sup>

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{iq\hbar}{m}\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{iq}{2m}(\nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2 + q\phi. \quad (3.59)$$

Poznato je da elektromagnetni potencijali nisu jedinstveni i da zavise od izbora gaugea (kalibracije). Mi ćemo koristiti Coulombov gauge u kojem je  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ . U tom slučaju se (3.59), uz oznaku  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ , svodi na

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + q\phi - \frac{q}{m}\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2 = \hat{H}_0 - \frac{q}{m}\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2, \quad (3.60)$$

<sup>2</sup>Pri kvadriranju pogodno je posmatrati kako operator  $(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}) \cdot (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})$  djeluje na proizvoljnu talasnu funkciju; tako se dobija faktor 2 uz  $\frac{iq\hbar}{2m}\mathbf{A} \cdot \nabla$ .

gdje operator  $\hat{H}_0$  određuje kretanje čestice u odsustvu elektromagnetnog polja. Interakcija sa elektromagnetnim poljem je određena sa članom sa skalarnim proizvodom  $\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ , dok zadnji član u (3.60) zavisi samo od  $\mathbf{A}$ . Za slaba polja taj član se može zanemariti. Ako je vektorski potencijal predstavljen ravnim elektromagnetnim talasom interakcioni član dovodi do radijacionih prelaza (emisije ili apsorpcije). Stanje čestice u elektromagnetnom polju je opisano rješenjima Schrödingerove jednačine sa hamiltonijanom (3.58):

$$\left[ \frac{(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2}{2m} + q\phi \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (3.61)$$

### 3.7 Paulijeva jednačina

S obzirom da spin interaguje sa elektromagnetnim poljem, elektron dobija dodatnu potencijalnu energiju

$$U = -\hat{\mathbf{M}} \cdot \mathbf{B}, \quad (3.62)$$

gdje je magnetni moment

$$\hat{\mathbf{M}} = g \frac{-|e|\hbar}{2m} \hat{\mathbf{S}} = -\mu_B \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (3.63)$$

pri čemu je za elektron  $q = -|e|$ ,  $g = 2$  i  $\mu_B = |e|\hbar/(2m)$ . Tada, uzimajući u obzir relaciju (3.60), hamiltonijan elektrona sa spinom u elektromagnetnom polju poprima oblik:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \mu_B \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}, \quad \hat{H}_0 = \frac{(\hat{\mathbf{p}} + |e|\mathbf{A})^2}{2m} - |e|\phi. \quad (3.64)$$

Schrödingerove jednačine sa hamiltonijanom (3.64) je poznata kao *Paulijeva jednačina*:

$$\left[ \frac{(\hat{\mathbf{p}} + |e|\mathbf{A})^2}{2m} - |e|\phi + \mu_B \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B} \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (3.65)$$

gdje je

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (3.66)$$

spinorska talasna funkcija. Takve dvokomponentne funkcije ćemo kratko zvati spinorima.<sup>3</sup>

<sup>3</sup>Ponekad se koristi naziv dvospinor da bismo ih razlikovali od četverospinora koji se pojavljuju u relativističkoj kvantnoj mehanici pri proučavanju Diracove jednačine.

Paulijeva jednačina predstavlja sistem od dvije spregnute diferencijalne jednačine za funkcije  $\psi_1$  i  $\psi_2$  koje opisuju elektrone sa  $z$  komponentom njihovog spina usmjerenim gore ili dole, respektivno. Na osnovu oblika Paulijevih spinskih matrica zaključujemo da je taj sistem raspregnut za  $\hat{\sigma}_z$ , a povezan za  $\hat{\sigma}_x$  i  $\hat{\sigma}_y$ .

Izračunajmo sada gustoću struje koja odgovara spinorskoj jednačini (3.65). Da bismo to uradili, prepisimo tu jednačinu u obliku:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi + \mu_B \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B} \Psi. \quad (3.67)$$

Odgovarajuća hermitski adjungirana jednačina glasi:

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial t} = \hat{H}_0^* \Psi^\dagger + \mu_B (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B} \Psi)^\dagger = \hat{H}_0^* \Psi^\dagger + \mu_B \Psi^\dagger \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}, \quad (3.68)$$

gdje smo iskoristili to da je  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  hermitska matrica i da je magnetno polje  $\mathbf{B}$  realno. Pomnožimo sada (3.67) slijeva sa  $\Psi^\dagger$ , a (3.68) zdesna sa  $\Psi$ . Oduzimanjem tih jednačina dobijamo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^\dagger \Psi) = \Psi^\dagger (\hat{H}_0 \Psi) - (\hat{H}_0^* \Psi^\dagger) \Psi. \quad (3.69)$$

Uvrštavanjem  $\hat{H}_0$  svi dijelovi koji ne sadrže operatore se skrate, tj. ostaje samo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^\dagger \Psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi^\dagger \nabla^2 \Psi - (\nabla^2 \Psi^\dagger) \Psi] - \frac{i\hbar|e|}{2m} \left\{ \Psi^\dagger (\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla) \Psi + [(\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla) \Psi^\dagger] \Psi \right\}. \quad (3.70)$$

Prvi član na desnoj strani se može transformisati u:

$$\Psi^\dagger \nabla^2 \Psi - (\nabla^2 \Psi^\dagger) \Psi = \nabla [\Psi^\dagger \nabla \Psi - (\nabla \Psi^\dagger) \Psi], \quad (3.71)$$

dok za drugi član dobijamo:

$$\begin{aligned} & \Psi^\dagger (\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla) \Psi + [(\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla) \Psi^\dagger] \Psi \\ &= 2\Psi^\dagger \Psi \operatorname{div} \mathbf{A} + 2\mathbf{A} \cdot [\Psi^\dagger \nabla \Psi + (\nabla \Psi^\dagger) \Psi] \\ &= 2\Psi^\dagger \Psi \operatorname{div} \mathbf{A} + 2\mathbf{A} \cdot \nabla (\Psi^\dagger \Psi) = 2 \operatorname{div} (\mathbf{A} \Psi^\dagger \Psi). \end{aligned} \quad (3.72)$$

Dakle, jednačina (3.69) se svodi na:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^\dagger \Psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{div} [\Psi^\dagger \nabla \Psi - (\nabla \Psi^\dagger) \Psi] - \frac{i\hbar|e|}{m} \operatorname{div} (\mathbf{A} \Psi^\dagger \Psi). \quad (3.73)$$

Ovo je *jednačina neprekidnosti* u obliku:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad (3.74)$$

gdje je

$$w = \Psi^\dagger \Psi \quad (3.75)$$

*gustoća vjerovatnoće*, a

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} [\Psi^\dagger \nabla \Psi - (\nabla \Psi^\dagger) \Psi] + \frac{|e|\hbar}{m} \mathbf{A} \Psi^\dagger \Psi \quad (3.76)$$

*gustoća struje* elektrona.

Uvrštavanjem dvokomponentnih talasnih funkcija

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad \text{i} \quad \Psi^\dagger = (\psi_1^* \quad \psi_2^*) \quad (3.77)$$

u gornje jednačine, dobijamo

$$w = \psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2, \quad (3.78)$$

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi_1 \nabla \psi_1^* + \psi_2 \nabla \psi_2^* - \psi_1^* \nabla \psi_1 - \psi_2^* \nabla \psi_2) + \frac{|e|\hbar}{m} \mathbf{A} (\psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2),$$

tj.

$$\begin{aligned} \mathbf{j} = & \frac{i\hbar}{2m} (\psi_1 \nabla \psi_1^* - \psi_1^* \nabla \psi_1) + \frac{|e|\hbar}{m} \mathbf{A} \psi_1^* \psi_1 \\ & + \frac{i\hbar}{2m} (\psi_2 \nabla \psi_2^* - \psi_2^* \nabla \psi_2) + \frac{|e|\hbar}{m} \mathbf{A} \psi_2^* \psi_2. \end{aligned} \quad (3.79)$$

Dakle, i *gustoća vjerovatnoće* i *gustoća struje* se sastoje od doprinosa dvaju različitih smjerova orijentacije spina, što smo i očekivali. Množenjem *gustoće struje* čestice  $\mathbf{j}$  sa nabojem elektrona  $-|e|\hbar$  dobijamo električnu *gustoću struje* elektrona  $\mathbf{j}_e$ .

*Gustoća struje*  $\mathbf{j}_e$  ne sadrži spin. To je *gustoća struje* uzrokovana orbitalnim kretanjem elektrona (različitog spina). Međutim, spin elektrona također uzrokuje magnetni moment, koji se može izraziti preko odgovarajuće *struje*. Ovaj dio *gustoće struje*  $\mathbf{j}_s$  ćemo zvati *spinska gustoća struje*. Ova *gustoća struje* se ne može pojaviti u jednačini kontinuiteta u kojoj je sačuvanje naelektrisanja izraženo konvekcionim strujama.

Da bismo odredili *spinsku gustoću struje*  $\mathbf{j}_s$ , krenut ćemo od Maxwellove teorije elektromagnetnog polja. Za rotor polja  $\mathbf{B}$  vrijedi relacija:

$$\operatorname{rot} \mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{j}_e + \operatorname{rot} \langle \mathbf{M} \rangle). \quad (3.80)$$

Zamijenili smo magnetizaciju sa srednjom gustoćom magnetnog momenta  $\langle \mathbf{M} \rangle$ , gdje se misli na usrednjavanje po stanjima spina. Gustoća magnetnog dipola je data sa:

$$\langle \mathbf{M} \rangle = -\mu_B \Psi^\dagger \hat{\boldsymbol{\sigma}} \Psi, \quad (3.81)$$

tako da je

$$\text{rot } \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} = \mu_0 (\mathbf{j}_e - \mu_B \Psi^\dagger \hat{\boldsymbol{\sigma}} \Psi) = \mu_0 (\mathbf{j}_e + \mathbf{j}_s). \quad (3.82)$$

Doprinos

$$\mathbf{j}_s = -\mu_B \Psi^\dagger \hat{\boldsymbol{\sigma}} \Psi \quad (3.83)$$

je struja koja uzrokuje magnetne momente elektrona.

# Poglavlje 4

## Kvantna mehanika višečestičnih sistema

### 4.1 Uvod. Jednačina neprekidnosti

Hamiltonova funkcija sistema koji se sastoji od  $N$  čestica sa masama  $m_j$ ,  $j = 1, \dots, N$ , u klasičnoj mehanici ima oblik:

$$H = \sum_{j=1}^N \left[ \frac{\mathbf{p}_j^2}{2m_j} + V_j(\mathbf{r}_j, t) \right] + \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} V_{jk}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k). \quad (4.1)$$

Tu je  $V_j(\mathbf{r}_j, t)$  vanjski jednočestični potencijal u kojem se kreće  $j$ -ta čestica (to može npr. biti potencijal vanjskog elektromagnetnog polja), a  $V_{jk}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k)$  predstavlja potencijal međudjelovanja čestica  $j$  i  $k$  (to može biti npr. međusobna Coulombova interakcija tih čestica). U zadnjem članu se uzima jedna polovina sume po različitim vrijednostima  $j$  i  $k$  da se ne bi dva puta uzela u obzir interakcija  $j$ -te i  $k$ -te čestice. Ovo se može pisati i bez faktora  $1/2$  ako se označi da je suma po svim parovima  $j$  i  $k$  takvim da je  $j < k$ .

Hamiltonijan odgovarajućeg kvantno-mehaničkog sistema dobijamo na uobičajeni način tako što u Hamiltonovoj funkciji (4.1) zamijenimo impulse čestica odgovarajućim diferencijalnim operatorima:

$$\mathbf{p}_j \rightarrow \hat{\mathbf{p}}_j = -i\hbar \nabla_j, \quad (4.2)$$

gdje index  $j$  kod operatora  $\nabla$  označava da gradijent djeluje samo na koordinate  $j$ -te čestice. Kao posljedica toga, operatori impulsa različitih čestica komutiraju, tj.  $[\hat{\mathbf{p}}_j, \hat{\mathbf{p}}_k]_- = \mathbf{0}$  za svaki  $j, k$ . Dakle, hamiltonijan višečestičnog kvantnomehaničkog sistema je:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_j} \Delta_j + V_j(\mathbf{r}_j, t) \right] + \sum_{j < k} V_{jk}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k), \quad \Delta_j \equiv \nabla_j^2. \quad (4.3)$$

Ovo je očigledno generalizacija jednočestičnog hamiltonijana. Odgovarajuća višečestična Schrödingerova jednačina glasi:

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi, \quad (4.4)$$

gdje valna funkcija sada zavisi od  $3N$  koordinata svih čestica i vremena:

$$\psi = \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_k, y_k, z_k, \dots, x_N, y_N, z_N, t). \quad (4.5)$$

Pri prelazu sa kvantne mehanike jedne čestice na kvantnu mehaniku višečestičnih sistema srećemo se sa istim problemima kao i u klasičnoj fizici. Naime, problem je znatno kompleksniji i potrebno je prvo uvesti odgovarajuću terminologiju.

Valna funkcija je definisana u prostoru sa  $3N$  dimenzija, u tzv. *konfiguracionom prostoru* sistema. Naziv konfiguracioni prostor potiče od toga što zadavanje koordinata određene tačke u tom prostoru znači specifikaciju trodimenzionalnih koordinata položaja  $(x_k, y_k, z_k)$  za sve čestice sistema ( $k = 1, 2, \dots, N$ ), čime je određena konfiguracija svih čestica u trodimenzionalnom prostoru. Tačka  $(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N)$  u konfiguracionom prostoru sa  $3N$  koordinata se naziva *konfiguracionom tačkom* sistema.

Infinitesimalno mali element zapremine u konfiguracionom prostoru označavamo sa  $dV$ :

$$dV = dV_1 \cdots dV_k \cdots dV_N = dx_1 dy_1 dz_1 \cdots dx_k dy_k dz_k \cdots dx_N dy_N dz_N. \quad (4.6)$$

Veličina

$$w(x_1, y_1, z_1, \dots, x_k, y_k, z_k, \dots, x_N, y_N, z_N, t)dV = \psi^*\psi dV \quad (4.7)$$

je vjerovatnoća nalaženja sistema u trenutku  $t$  u elementu zapremine  $dV$  konfiguracionog prostora. Ovo znači da je  $w$  gustoća vjerovatnoće za određenu konfiguraciju sistema, za koju, u trenutku  $t$ , koordinate prve čestice leže u intervalima  $[x_1, x_1 + dx_1]$ ,  $[y_1, y_1 + dy_1]$ ,  $[z_1, z_1 + dz_1]$ ,  $k$ -te čestice u intervalima  $[x_k, x_k + dx_k]$ ,  $[y_k, y_k + dy_k]$ ,  $[z_k, z_k + dz_k]$ , itd. Osim elementa zapremine  $dV$ , također se uvode elementi zapremine određenih potprostora koji se označavaju sa  $d\Omega_k, d\Omega_{kj}, \dots$  itd., i koji su definisani sa:

$$\begin{aligned} dV &= dx_k dy_k dz_k d\Omega_k = dV_k d\Omega_k, \\ dV &= dx_k dy_k dz_k dx_j dy_j dz_j d\Omega_{kj} = dV_k dV_j d\Omega_{kj}, \quad \text{itd.} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Integrirajući (4.7) po koordinatama svih čestica, isključujući  $k$ -tu česticu, tj. po  $d\Omega_k$ , nalazimo gustoću vjerovatnoće da  $x$ ,  $y$  i  $z$  koordinate  $k$ -te čestice



leže između  $x_k$  i  $x_k + dx_k$ ,  $y_k$  i  $y_k + dy_k$ , i  $z_k$  i  $z_k + dz_k$ , respektivno, pri čemu su sve ostale čestice u proizvoljnim položajima. Drugim riječima, nalazimo vjerovatnoću da  $k$ -ta čestica bude blizu datog položaja u prostoru. Obilježavajući ovu vjerovatnoću sa  $W(x_k, y_k, z_k, t)$ , dobijamo:

$$W(x_k, y_k, z_k, t) dx_k dy_k dz_k = dx_k dy_k dz_k \int \psi^* \psi d\Omega_k. \quad (4.9)$$

Na sličan način, veličina

$$\begin{aligned} & W(x_k, y_k, z_k, x_j, y_j, z_j, t) dx_k dy_k dz_k dx_j dy_j dz_j \\ &= dx_k dy_k dz_k dx_j dy_j dz_j \int \psi^* \psi d\Omega_{kj} \end{aligned} \quad (4.10)$$

je vjerovatnoća da se  $k$ -ta čestica nalazi u tački  $(x_k, y_k, z_k)$ , pri čemu je istovremeno  $j$ -ta čestica u tački  $(x_j, y_j, z_j)$ . Ako nam je poznata talasna funkcija  $\psi$ , zadana u konfiguracionom prostoru, tada možemo odrediti vjerovatnoću date konfiguracije sistema (4.7), vjerovatnoću položaja bilo koje čestice (4.9), i konačno vjerovatnoću položaja bilo kojeg para čestica (4.10). Na analogan način, vjerovatnoću za vrijednost neke fizikalne veličine koja nam je od interesa možemo izračunati razvijajući talasnu funkciju  $\psi$  po vlastitim funkcijama operatora koji odgovara toj veličini i primjenjujući opšti formalizam kvantne mehanike.

Pretpostavljamo da talasna funkcija  $\psi(x_1, \dots, z_N, t)$ , analogno kao jednočestična talasna funkcija, zadovoljava Schrödingerovu jednačinu (4.4) sa hamiltonijanom (4.3) višestičnog sistema, koji se može napisati u obliku:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_j} \nabla_j^2 + V_j(x_j, y_j, z_j, t) \right] + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j, k=1 \\ (j \neq k)}}^N V_{jk}(x_j, y_j, z_j, x_k, y_k, z_k), \quad (4.11)$$

gdje je  $\nabla_j^2 = \partial^2/\partial x_j^2 + \partial^2/\partial y_j^2 + \partial^2/\partial z_j^2$  Laplaceov operator koji djeluje na  $j$ -tu česticu. Da bismo izveli jednačinu neprekidnosti za vjerovatnoću  $w$  u konfiguracionom prostoru pomnožimo (4.4) slijeva sa  $\psi^*$  i oduzmimo tako dobijenu jednačinu od odgovarajuće kompleksno-konjugovane jednačine. Dobijamo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^N \frac{1}{m_j} (\psi^* \nabla_j^2 \psi - \psi \nabla_j^2 \psi^*). \quad (4.12)$$

Uzimajući u obzir da je  $w = \psi^* \psi$  i označavajući:

$$\mathbf{j}_k = \frac{i\hbar}{2m_k} (\psi \nabla_k \psi^* - \psi^* \nabla_k \psi), \quad (4.13)$$

gdje je  $\nabla_k = (\frac{\partial}{\partial x_k}, \frac{\partial}{\partial y_k}, \frac{\partial}{\partial z_k})$ , možemo jednačinu (4.12) prepisati kao:

$$\frac{\partial w(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)}{\partial t} + \sum_{j=1}^N \operatorname{div}_j \mathbf{j}_j(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = 0. \quad (4.14)$$

Ova jednačina pokazuje da je promjena u konfiguracionoj vjerovatnoći  $w$  određena strujom te vjerovatnoće. Zbog toga je  $\mathbf{j}_j$  funkcija koordinata svih čestica (i vremena) i predstavlja gustoću struje uzrokovane kretanjem  $j$ -te čestice ako su koordinate svih ostalih  $N - 1$  čestica fiksirane. Da bismo dobili gustoću struje  $j$ -te čestice sa ostalim česticama u proizvoljnim položajima, jednačinu (4.12) treba integrirati po svim koordinatama, osim po onim od  $j$ -te čestice, tj.:

$$\mathbf{J}_j(x_j, y_j, z_j, t) = \int \mathbf{j}_j(x_1, \dots, x_j, y_j, z_j, \dots, z_N, t) d\Omega_j. \quad (4.15)$$

Ova gustoća struje također zadovoljava jednačinu neprekidnosti, ali sada u trodimenzionalnom prostoru, tj. ako integriramo (4.14) po  $d\Omega_j$ , dobijamo:

$$\int \frac{\partial}{\partial t} w(x_1, \dots, z_N, t) d\Omega_j = \frac{\partial}{\partial t} \int w(x_1, \dots, z_N, t) d\Omega_j = \frac{\partial}{\partial t} W(x_j, y_j, z_j, t).$$

Štaviše, vrijedi relacija:

$$\sum_{j'=1}^N \int \operatorname{div}_{j'} \mathbf{j}_{j'} d\Omega_j = \int \operatorname{div}_j \mathbf{j}_j d\Omega_j + \sum_{j' \neq j}^N \int \operatorname{div}_{j'} \mathbf{j}_{j'} d\Omega_j.$$

Element zapremine  $d\Omega_k$  [vidjeti (4.8)] sadrži koordinate svih čestica sa izuzetkom čestice  $k$ . Integrali oblika  $\int \operatorname{div}_{j'} \mathbf{j}_{j'} d\Omega_j$  mogu se transformisati u površinske integrale koji su, ako  $\psi$  iščezava u beskonačnosti, jednaki nuli. U integralu  $\int \operatorname{div}_j \mathbf{j}_j d\Omega_j$ , diferenciramo i integriramo u odnosu na različite varijable. Zbog toga imamo:

$$\int \operatorname{div}_j \mathbf{j}_j d\Omega_j = \operatorname{div}_j \int \mathbf{j}_j d\Omega_j = \operatorname{div}_j \mathbf{J}_j(x_j, y_j, z_j, t),$$

gdje smo koristili relaciju (4.15). Prema tome, dobili smo jednačinu neprekidnosti za svaku pojedinačnu česticu,

$$\frac{\partial W(x_j, y_j, z_j, t)}{\partial t} + \operatorname{div}_j \mathbf{J}_j(x_j, y_j, z_j, t) = 0, \quad (4.16)$$

u trodimenzionalnom prostoru  $(x_j, y_j, z_j, t)$ .

## 4.2 Zakon očuvanja ukupnog impulsa sistema čestica

U klasičnoj mehanici ukupni impuls sistema čestica ostaje konstantan pod pretpostavkom da nema vanjskih sila, tj. da na sistem djeluju samo unutrašnje sile. Prema Newtonovom zakonu centar masa takvog sistema se kreće pravolinijski sa konstantnom brzinom. Međutim, ako su prisutne vanjske sile onda je promjena ukupnog impulsa u jedinici vremena jednaka sumi svih tih vanjskih sila koje djeluju na čestice sistema. Pokazat ćemo da ovi principi klasične mehanike vrijede i za kvantne fenomene. U tu svrhu uvest ćemo operator ukupnog impulsa za sve čestice sistema  $\hat{\mathbf{p}}$  kao sumu pojedinačnih operatora impulsa  $\hat{\mathbf{p}}_k$  svih čestica  $k = 1, 2, \dots, N$ :

$$\hat{\mathbf{p}} = \sum_{k=1}^N \hat{\mathbf{p}}_k = -i\hbar \sum_{k=1}^N \nabla_k. \quad (4.17)$$

Izračunajmo izvod po vremenu ukupnog operatora impulsa  $\hat{\mathbf{p}}$ . Pošto taj operator ne zavisi eksplicitno od vremena, to je:

$$\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\hat{H}). \quad (4.18)$$

Uvrštavajući u ovu jednačinu hamiltonijan (4.11) i uzimajući u obzir da operator  $\hat{\mathbf{p}}$  komutira sa operatorom kinetičke energije

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{k=1}^N \frac{1}{m_k} \nabla_k^2,$$

dobijamo:

$$\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = \left( \sum_{k=1}^N V_k + \sum_{k<j}^N V_{kj} \right) \left( \sum_{i=1}^N \nabla_i \right) - \left( \sum_{i=1}^N \nabla_i \right) \left( \sum_{k=1}^N V_k + \sum_{k<j}^N V_{kj} \right). \quad (4.19)$$

Pored toga, vrijedi relacija:

$$V_k \left( \sum_{i=1}^N \nabla_i \right) - \left( \sum_{i=1}^N \nabla_i \right) V_k = -\nabla_k V_k(x_k, y_k, z_k), \quad (4.20)$$

jer  $V_k(\mathbf{r}_k)$  zavisi samo od koordinata  $\mathbf{r}_k$   $k$ -te čestice.

Konačno, izračunajmo komutator operatora  $\sum_{i=1}^N \nabla_i$  sa interakcionom energijom čestica  $\sum_{k<j} V_{kj}$ . Pri tome pretpostavljamo da sila interakcije

između  $k$ -te i  $j$ -te čestice zavisi samo od njihove udaljenosti  $r_{kj} = |\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j|$ , tako da je  $V_{kj} = V_{kj}(r_{kj})$ . Tada samo oni operatori  $\nabla_i$  iz sume  $\sum_{i=1}^N \nabla_i$  za koje je  $i = k$  ili  $i = j$  djeluju na  $V_{kj}$ , tj. samo  $\nabla_k + \nabla_j$  pri djelovanju na  $V_{kj}$  daje rezultat različit od nule. Zbog toga ispitujemo samo komutator

$$V_{kj} (\nabla_k + \nabla_j) - (\nabla_k + \nabla_j) V_{kj} = -\nabla_k V_{kj} - \nabla_j V_{kj}. \quad (4.21)$$

Vrijedi:

$$\nabla_k V_{kj} = \frac{dV_{kj}}{dr_{kj}} \nabla_k r_{kj} = \frac{dV_{kj}}{dr_{kj}} \frac{\mathbf{r}_{kj}}{r_{kj}}, \quad \nabla_j V_{kj} = \frac{dV_{kj}}{dr_{kj}} \nabla_j r_{kj} = -\frac{dV_{kj}}{dr_{kj}} \frac{\mathbf{r}_{kj}}{r_{kj}},$$

tako da je:

$$\nabla_k V_{kj} + \nabla_j V_{kj} = 0. \quad (4.22)$$

Ovo je upravo Newtonov zakon, prema kojem je *akcija* = *-reakcija*. Iz ovoga slijedi da je komutator (4.21) jednak nuli, tako da, na osnovu (4.19) i (4.20), dobijamo:

$$\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = -\sum_{k=1}^N \nabla_k V_k(x_k, y_k, z_k, t), \quad (4.23)$$

tj. izvod po vremenu ukupnog operatora impulsa je jednak operatoru rezultujuće sile koja djeluje na sistem preko vanjskih polja. Ovaj zakon je analogan zakonu sačuvanja impulsa u klasičnoj mehanici. Jedina razlika leži u činjenici da u kvantnoj mehanici to nije formulisano za prave mehaničke veličine, već za operatore koji predstavljaju te veličine, pa, prema tome, u skladu sa Ehrenfestovim teoremom, i za srednje vrijednosti tih veličina. Ako nema vanjskih sila, tj. ako je  $V_k = 0$  za svaki  $k$ , tada iz (4.23) slijedi da je:

$$\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = 0. \quad (4.24)$$

Dakle, ukupni impuls sistema međusobno interagujućih čestica je sačuvan u odsustvu vanjskih sila. Operatorska jednačina (4.24) znači sljedeće:

- srednja vrijednost ukupnog impulsa se ne mijenja u toku vremena,
- vjerovatnoće  $w(\mathbf{p})$  nalaženja određene vrijednosti ukupnog impulsa  $\mathbf{p}$  također ostaju nepromijenjene.

### 4.3 Kretanje centra masa sistema čestica

Pokazat ćemo sada da kretanje centra masa sistema čestica ne zavisi od relativnog kretanja njegovih sastavnih dijelova. Ova činjenica je dobro poznata u klasičnoj mehanici i također vrijedi u kvantnoj mehanici.

Razmatramo hamiltonijan  $\hat{H}$  koji uzima u obzir samo uticaj unutrašnjih sila:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\hat{T} + W, \quad \hat{T} = \sum_{k=1}^N \frac{1}{m_k} \nabla_k^2, \quad W = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^N V_{kj}(r_{kj}). \quad (4.25)$$

Ovaj hamiltonijan ćemo izraziti koristeći se *Jacobijevim koordinatama*, tj. sa  $3N - 3$  relativnih koordinata i koordinatama centra masa  $X, Y, Z$  koje su definisane sa:

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \frac{m_1 x_1}{m_1} - x_2 \equiv x_1 - x_2, \\ \xi_2 &= \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} - x_3, \\ &\vdots \\ \xi_j &= \frac{\sum_{k=1}^j m_k x_k}{\sum_{k=1}^j m_k} - x_{j+1}, \\ &\vdots \\ \xi_N &= \frac{\sum_{k=1}^N m_k x_k}{M} \equiv X, \end{aligned} \quad (4.26)$$

gdje  $M = \sum_{k=1}^N m_k$  označava ukupnu masu sistema. Slični izrazi se mogu dobiti i za  $y$  i  $z$  koordinate:

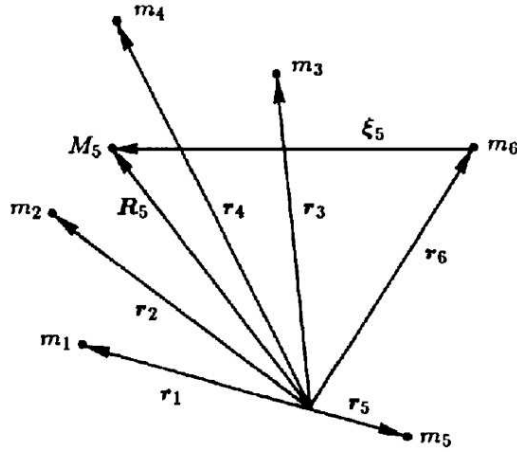
$$\eta_j = \frac{\sum_{k=1}^j m_k y_k}{\sum_{k=1}^j m_k} - y_{j+1}, \quad \eta_N \equiv Y; \quad (4.27)$$

$$\zeta_j = \frac{\sum_{k=1}^j m_k z_k}{\sum_{k=1}^j m_k} - z_{j+1}, \quad \zeta_N \equiv Z. \quad (4.28)$$

Ove formule su generalizacija relacija između centra mase i relativnih koordinata sistema dvaju tijela. Bitan je princip konstrukcije: Jacobijev vektor  $\xi_j = \{\xi_j, \eta_j, \zeta_j\}$  je vektor od centra mase prvih  $j$  čestica do  $(j+1)$ -ve čestice. Slika 4.1 ilustruje tu situaciju.

Za operator kinetičke energije imamo:

$$\hat{T} = \frac{1}{M} \nabla^2 + \sum_{j=1}^{N-1} \frac{1}{\mu_j} \nabla_j^2, \quad (4.29)$$



Slika 4.1: Jacobijeve koordinate  $\xi_j$  za slučaj vektora  $\xi_5$  koji je usmjeren od centra masa  $\mathbf{R}_5$  prvih pet čestica prema vektoru položaja  $\mathbf{r}_6$  šeste čestice.

gdje

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial \xi_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial \zeta_N^2} = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \quad (4.30)$$

označava Laplaceov operator centra masa svih čestica, a

$$\nabla_j^2 = \frac{\partial^2}{\partial \xi_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial \zeta_j^2} \quad (4.31)$$

je Laplaceov operator Jacobijevih koordinata  $\xi_j = \{\xi_j, \eta_j, \zeta_j\}$ . Redukovana masa  $\mu_j$  je data sa

$$\frac{1}{\mu_j} = \frac{1}{\sum_{k=1}^j m_k} + \frac{1}{m_{j+1}}, \quad (4.32)$$

gdje su  $m_1, \dots, m_N$  mase  $N$  čestica.

Hamiltonijan (4.25) se može prepisati u obliku:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 - \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\hbar^2}{2\mu_j} \nabla_j^2 + W(\xi_1, \dots, \xi_{N-1}, \eta_1, \dots, \eta_{N-1}, \zeta_1, \dots, \zeta_{N-1}). \quad (4.33)$$

Na osnovu relacije (4.30) zaključujemo da operator

$$\hat{T}_s \equiv -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right) \quad (4.34)$$

predstavlja operator kinetičke energije centra masa svih čestica. Operator kinetičke energije relativnog (unutrašnjeg) kretanja čestice je dat sa:

$$\hat{T}_R \equiv - \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\hbar^2}{2\mu_j} \nabla_j^2. \quad (4.35)$$

Relacija (4.33) nam pokazuje da energija međudjelovanja ne zavisi od koordinata centra masa  $\xi_N = \{\xi_N, \eta_N, \zeta_N\} = \{X, Y, Z\}$ . Ona zavisi samo od rastojanja između čestica, tj. relativnih koordinata koje se mogu izraziti preko prvih  $(N-1)$  Jacobijevih koordinata  $\xi_1, \dots, \xi_{N-1}$ . Ako transformišemo  $\xi_1, \dots, \xi_{N-1}$ , tj.  $(\xi_1, \dots, \xi_{N-1}, \eta_1, \dots, \eta_{N-1}, \zeta_1, \dots, \zeta_{N-1})$ , linearnom transformacijom u proizvoljne relativne koordinate  $q_1, q_2, \dots, q_{3N-3}$ , operator  $\hat{T}_S$  ostaje nepromijenjen. Dakle, relaciju (4.33) možemo poopštiti na:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + \hat{H}_R(q_1, q_2, \dots, q_{3N-3}). \quad (4.36)$$

Definišimo komponente operatora ukupnog impulsa pomoću relacija:

$$\hat{P}_X = -i\hbar \frac{\partial}{\partial X}, \quad \hat{P}_Y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial Y}, \quad \hat{P}_Z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial Z}. \quad (4.37)$$

Tada možemo pisati operator kinetičke energije centra masa u obliku:

$$\hat{T}_S = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} = \frac{\hat{P}_X^2 + \hat{P}_Y^2 + \hat{P}_Z^2}{2M} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta. \quad (4.38)$$

Totalni hamiltonijan  $\hat{H} = \hat{T}_S + \hat{H}_R$  ne zavisi od vremena, hamiltonijan relativnog kretanja  $\hat{H}_R$  ne zavisi od koordinata centra masa, a operator kinetičke energije centra masa  $\hat{T}_S$  ne zavisi od relativnih koordinata, tako da talasnu funkciju možemo razdvojiti na tri dijela - na relativni dio  $\psi(q_1, q_2, \dots, q_{3N-3})$ , na dio sa koordinatama centra masa  $\phi(X, Y, Z)$  i na vremenski zavisni faktor  $f(t)$ :

$$\Psi(X, Y, Z, q_1, q_2, \dots, q_{3N-3}, t) = \phi(X, Y, Z) \psi(q_1, q_2, \dots, q_{3N-3}) f(t). \quad (4.39)$$

Ako (4.39) uvrstimo u Schrödingerovu jednačinu  $i\hbar \partial \Psi / \partial t = \hat{H} \Psi$ , dobijamo:

$$\phi \psi i\hbar \frac{\partial f}{\partial t} = f \left( \psi \hat{T}_S \phi + \phi \hat{H}_R \psi \right). \quad (4.40)$$

Dijeljenjem (4.40) sa  $\phi \psi f$  (za  $\phi \psi f \neq 0$ ) nalazimo da je:

$$i\hbar \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\phi} \hat{T}_S \phi + \frac{1}{\psi} \hat{H}_R \psi = \text{const} = E_S + E_R, \quad (4.41)$$

gdje smo u konstanti razdvojili energiju  $E_S$  koja se odnosi na kretanje centra masa i energiju relativnog kretanja  $E_R$ . Rješenje za vremenski zavisnu funkciju je:

$$f(t) = \exp[-i(E_S + E_R)t/\hbar], \quad (4.42)$$

a za funkcije  $\phi$  i  $\psi$  se, nakon što se na lijevu stranu jednakosti izdvoje funkcije koje zavise samo od koordinata centra masa, a na desnu stranu funkcije koje zavise samo od relativnih koordinata, dobija:

$$\frac{1}{\phi} \hat{T}_S \phi - E_S = \frac{1}{\psi} \hat{H}_R \psi - E_R.$$

Ova jednakost je moguća samo ako su obadvije njezine strane jednake nekoj konstanti  $E$  koju možemo izabrati da je jednaka nuli. Tako dobijamo da za funkcije  $\phi(X, Y, Z)$  i  $\psi(q_1, q_2, \dots, q_{3N-3})$  vrijede relacije:

$$\hat{T}_S \phi = E_S \phi, \quad (4.43)$$

$$\hat{H}_R \psi = E_R \psi. \quad (4.44)$$

Najjednostavnije specijalno rješenje jednačine (4.43) je dato ravnim talasom (de Broglievim talasom), tj.

$$\begin{aligned} \phi(X, Y, Z) &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(P_X X + P_Y Y + P_Z Z)\right] \\ &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot \mathbf{X}\right). \end{aligned} \quad (4.45)$$

Uvrštavajući  $\phi$  u stacionarnu Schrödingerovu jednačinu (4.43) zaključujemo da je  $\mathbf{P} = (P_X, P_Y, P_Z)$  vlastita vrijednost operatora ukupnog impulsa. Za vlastitu vrijednost kinetičke energije kretanja centra masa  $E_S$  slijedi da je:

$$E_S = \frac{1}{2M} (P_X^2 + P_Y^2 + P_Z^2). \quad (4.46)$$

Talasna dužina de Broglievog talasa je data sa:

$$\lambda = \frac{h}{P} = \frac{h}{MV}, \quad P = \sqrt{P_X^2 + P_Y^2 + P_Z^2}, \quad (4.47)$$

gdje je  $V$  brzina centra masa. Talasna funkcija  $\Phi(X, Y, Z, t) = \phi(X, Y, Z) \times \exp(-iE_S t/\hbar)$  zadovoljava Schrödingerovu jednačinu  $i\hbar\partial\Phi/\partial t = \hat{T}_S\Phi = E_S\Phi$  kojom je opisano kretanje centra masa sistema čestica sa ukupnom masom  $M$ . Pošto na sistem ne djeluju vanjske sile centar masa se kreće kao slobodna čestica mase  $M$ .



Sada možemo zaključiti iz (4.45)–(4.47) da de Broglievi talasi (4.45) nisu oscilacije povezane sa unutrašnjom strukturom sistema čestica, već da predstavljaju opšte kvantno-mehaničko kretanje slobodnih čestica (ili, u našem slučaju, kretanje centra masa, tj. kretanje sistema kao cjeline) bez vanjskih sila.

Osnovni i zanimljivi aspekti višečestičnog problema tiču se unutrašnjih stepeni slobode, opisanih relacijom (4.44). Kretanje centra masa je, kao i u klasičnoj mehanici, prilično trivijalan aspekt. Bitno je samo ako se sve čestice sistema kreću pod uticajem nekog vanjskog polja ili interaguju sa drugim kompleksnim sistemima. Pri tome može doći i do formiranja *klaster* (*engl. cluster*) *struktura* tj. do razdvajanja  $N$ -čestičnog sistema na različite podstrukture. Klaster strukture igraju važnu ulogu u nuklearnoj fizici i, u novije vrijeme, u laserskoj fizici.

Vraćajući se našem izvođenju, rješenje za (4.39), uzimajući u obzir (4.42) i (4.45), možemo prepisati u obliku:

$$\begin{aligned} & \Psi(X, Y, Z, q_1, q_2, \dots, q_{3N-3}, t) \\ &= (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{-i(\mathbf{P}\cdot\mathbf{X}-E_{\text{st}}t)/\hbar} \psi(q_1, q_2, \dots, q_{3N-3}) e^{-iE_{\text{R}}t/\hbar}. \end{aligned} \quad (4.48)$$

## 4.4 Zakon očuvanja ukupnog ugaonog momenta

Ponovo razmatramo sistem od  $N$  čestica i pišemo komponente orbitalnog ugaonog momenta čestice  $k$  u Descartesovim koordinata kao  $\hat{\mathbf{l}}^k = (\hat{l}_x^k, \hat{l}_y^k, \hat{l}_z^k)$ . Vektor položaja  $k$ -te čestice je  $\mathbf{r}_k = (x_k, y_k, z_k)$ . Tada vrijedi:

$$\begin{aligned} \hat{l}_x^k &= -i\hbar \left( y_k \frac{\partial}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \right), \\ \hat{l}_y^k &= -i\hbar \left( z_k \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial z_k} \right), \\ \hat{l}_z^k &= -i\hbar \left( x_k \frac{\partial}{\partial y_k} - y_k \frac{\partial}{\partial x_k} \right). \end{aligned} \quad (4.49)$$

Komponente operatora ukupnog orbitalnog ugaonog momenta sistema  $\hat{\mathbf{l}} = (\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z)$  su definisane kao suma pojedinačnih ugaonih momenata, tj. kao:

$$\hat{l}_x = \sum_{k=1}^N \hat{l}_x^k, \quad \hat{l}_y = \sum_{k=1}^N \hat{l}_y^k, \quad \hat{l}_z = \sum_{k=1}^N \hat{l}_z^k. \quad (4.50)$$

Sada ćemo dokazati da je izvod operatora ugaonog momenta po vremenu

jednak operatoru momenta sile koja djeluje na sistem. Vremenski izvod operatora  $\hat{l}_x$  koji nije eksplicitno zavisin od vremena je dat sa:

$$\frac{d\hat{l}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{l}_x]. \quad (4.51)$$

Hamiltonijan  $N$ -čestičnog sistema sa masama  $m_1, m_2, \dots, m_N$  ima oblik:

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}_k^2}{2m_k} + V_k(x_k, y_k, z_k, t) \right] + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j, k=1 \\ j \neq k}}^N V_{kj}(x_k, y_k, z_k, x_j, y_j, z_j). \quad (4.52)$$

Kao i ranije,  $V_k$  odgovara potencijalnoj energiji  $k$ -te čestice u vanjskom polju, a  $V_{kj}$  je interakciona energija između čestica  $k$  i  $j$ . Svaka pojedinačna komponenta operatora ugaonog momenta komutira sa kvadratom tog operatora. Operatori ugaonih momenata različitih čestica komutiraju (jer djeluju u različitim koordinatnim prostorima) tako da vrijedi:  $[\hat{l}_m^k, \hat{l}_n^j] = 0$  za bilo koje  $k \neq j$  ( $m, n = x, y, z$ ). Svaka komponenta  $\hat{l}_i^k$  operatora ugaonog momenta čestice komutira sa kvadratom  $\hat{\mathbf{I}}^2$  operatora ukupnog ugaonog momenta:

$$[\hat{l}_i^k, \hat{\mathbf{I}}^2] = \left[ \hat{l}_i^k, (\hat{l}_i^k)^2 \right] = 0, \quad i = x, y, z. \quad (4.53)$$

Operator

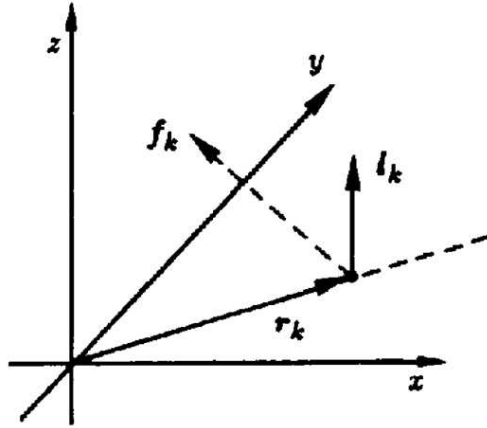
$$\hat{\mathbf{p}}_k^2 = -\hbar^2 \nabla_k^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} \right)$$

komutira sa operatorima  $\hat{l}_x^k, \hat{l}_y^k$  i  $\hat{l}_z^k$ . Provjerimo to npr. za  $x$  komponentu. Vrijedi:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{p}}_k^2, \hat{l}_x^k] &= i\hbar^3 \left[ \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}, y_k \frac{\partial}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \right] + i\hbar^3 \left[ \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2}, y_k \frac{\partial}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \right] \\ &= 0 + i\hbar^3 \left[ \frac{\partial}{\partial y_k} \left( \frac{\partial}{\partial z_k} + y_k \frac{\partial}{\partial z_k} \frac{\partial}{\partial y_k} - z_k \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} \right) - \left( y_k \frac{\partial}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \right) \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial z_k} \left( y_k \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} - \frac{\partial}{\partial y_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \frac{\partial}{\partial z_k} \right) - \left( y_k \frac{\partial}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \right) \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} \right] \\ &= i\hbar^3 \left( \frac{\partial}{\partial y_k} \frac{\partial}{\partial z_k} + \frac{\partial}{\partial z_k} \frac{\partial}{\partial y_k} + y_k \frac{\partial}{\partial z_k} \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} - z_k \frac{\partial^3}{\partial y_k^3} \right. \\ &\quad \left. - y_k \frac{\partial}{\partial z_k} \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + z_k \frac{\partial^3}{\partial y_k^3} + y_k \frac{\partial^3}{\partial z_k^3} - \frac{\partial}{\partial z_k} \frac{\partial}{\partial y_k} - \frac{\partial}{\partial y_k} \frac{\partial}{\partial z_k} \right. \\ &\quad \left. - z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} - y_k \frac{\partial^3}{\partial z_k^3} + z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} \right) = 0, \end{aligned}$$

tj.:

$$\left[ \nabla_k^2, \hat{l}_x^k \right] = 0. \quad (4.54)$$



Slika 4.2: Vektor položaja  $\mathbf{r}_k$ , njemu odgovarajući ugaoni moment  $\mathbf{l}_k$  i vanjska sila  $\mathbf{f}_k = -\nabla_k V_k(\mathbf{r}_k)$  koja djeluje na  $k$ -tu česticu.

Razdvojimo sada operator kinetičke energije u (4.52) na translacioni dio  $\hat{T}_{\mathbf{r}_k}$  duž radijus vektora  $\mathbf{r}_k$  i rotacioni dio:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_k} \nabla_k^2 = \hat{T}_{\mathbf{r}_k} + \frac{(\hat{\mathbf{l}}^k)^2}{2m_k r_k^2}. \quad (4.55)$$

Kako svaka komponenta operatora ugaonog momenta čestice komutira sa  $(\hat{\mathbf{l}}^k)^2$  i sa  $\nabla_k^2$ , to, prema (4.55), ona također komutira sa  $\hat{T}_{\mathbf{r}_k}$ :

$$\left[ \hat{T}_{\mathbf{r}_k}, \hat{l}_i^k \right] = 0, \quad i = x, y, z. \quad (4.56)$$

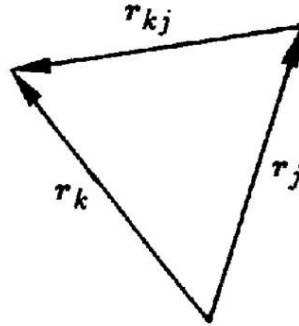
Da bismo izračunali (4.51) trebamo komutatore  $\left[ V_k, \hat{l}_i^k \right]$  i  $\left[ V_{kj}, \hat{l}_i^k \right]$ . Vrijedi:

$$\begin{aligned} V_k \hat{l}_x^k - \hat{l}_x^k V_k &= -i\hbar \left[ V_k \left( y_k \frac{\partial}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \right) - \left( y_k \frac{\partial}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \right) V_k \right] \\ &= i\hbar \left( y_k \frac{\partial V_k}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial V_k}{\partial y_k} \right), \end{aligned} \quad (4.57)$$

i, analogno:

$$\left[ V_{kj}, \hat{l}_x^k \right] = i\hbar \left( y_k \frac{\partial V_{kj}}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial V_{kj}}{\partial y_k} \right). \quad (4.58)$$

Za derivacije u (4.58), koristeći relaciju za relativne koordinate  $\mathbf{r}_{kj} = \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j$



Slika 4.3: Relativni vektor  $\mathbf{r}_{kj}$  između  $k$ -te i  $j$ -te čestice, definisan kao  $\mathbf{r}_{kj} = \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j$ .

(vidjeti sliku 4.3), dobijamo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z_k} &= \frac{\partial r_{kj}}{\partial z_k} \frac{\partial}{\partial r_{kj}} = \frac{\partial}{\partial z_k} \left( \sqrt{(x_k - x_j)^2 + (y_k - y_j)^2 + (z_k - z_j)^2} \right) \frac{\partial}{\partial r_{kj}} \\ &= \frac{z_k - z_j}{r_{kj}} \frac{\partial}{\partial r_{kj}}. \end{aligned}$$

Na sličan način nalazimo da je:

$$\frac{\partial}{\partial y_k} = \frac{y_k - y_j}{r_{kj}} \frac{\partial}{\partial r_{kj}}, \quad \frac{\partial}{\partial z_k} = \frac{z_k - z_j}{r_{kj}} \frac{\partial}{\partial r_{kj}},$$

tako da jednačina (4.58) poprima oblik:

$$\left[ V_{kj}, \hat{l}_x^k \right] = i\hbar \frac{\partial V_{kj}}{\partial r_{kj}} \left( y_k \frac{z_k - z_j}{r_{kj}} - z_k \frac{y_k - y_j}{r_{kj}} \right) = i\hbar (z_k y_j - z_j y_k) \frac{\partial V_{kj}}{\partial r_{kj}} \frac{1}{r_{kj}}. \quad (4.59)$$

Koristeći relacije (4.51) i (4.53)–(4.59) za izvod po vremenu od  $x$  komponente operatora ukupnog ugaonog momenta dobijamo:

$$\frac{d\hat{l}_x}{dt} = - \sum_{k=1}^N \left( y_k \frac{\partial V_k}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial V_k}{\partial y_k} \right) - \frac{1}{2} \sum_{\substack{j, k=1 \\ j \neq k}}^N (z_k y_j - z_j y_k) \frac{\partial V_{kj}}{\partial r_{kj}} \frac{1}{r_{kj}}. \quad (4.60)$$

Drugi član na desnoj strani u jednačini (4.60) je jednak nuli jer pojedini članovi sume mijenjaju predznak pri promjeni redosljeda indeksa, tako da se međusobno skraćuju. Rezultat je:

$$\frac{d\hat{l}_x}{dt} = - \sum_{k=1}^N \left( y_k \frac{\partial V_k}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial V_k}{\partial y_k} \right). \quad (4.61)$$

Na analogan način, za druge dvije komponente dobijamo:

$$\frac{d\hat{l}_y}{dt} = - \sum_{k=1}^N \left( z_k \frac{\partial V_k}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial V_k}{\partial z_k} \right), \quad (4.62)$$

$$\frac{d\hat{l}_z}{dt} = - \sum_{k=1}^N \left( x_k \frac{\partial V_k}{\partial y_k} - y_k \frac{\partial V_k}{\partial x_k} \right). \quad (4.63)$$

Tako smo dokazali teorem, odranije poznat iz mehanike, da je izvod po vremenu orbitalnog ugaonog momenta jednak *obrtnom momentu vanjskih sila* koje djeluju na sistem. Ako nema vanjskih sila, ili ako je njihov obrtni moment jednak nuli, ukupni ugaoni moment je sačuvan:

$$\frac{d\hat{l}_x}{dt} = \frac{d\hat{l}_y}{dt} = \frac{d\hat{l}_z}{dt} = 0. \quad (4.64)$$

U tom slučaju srednje vrijednosti  $\bar{l}_x$ ,  $\bar{l}_y$  i  $\bar{l}_z$  su konstante, kao i vjerovatnoće  $w(l_x)$ ,  $w(l_y)$  i  $w(l_z)$  nalaženja određenih vrijednosti za komponente ugaonog momenta.

Ako se uključi unutrašnji ugaoni moment ili spin  $s$  čestice, tada vrijede slijedeće relacije za ukupni ili totalni ugaoni moment:

$$\hat{j}_x = \sum_{k=1}^N (\hat{l}_x^k + \hat{s}_x^k), \quad \hat{j}_y = \sum_{k=1}^N (\hat{l}_y^k + \hat{s}_y^k), \quad \hat{j}_z = \sum_{k=1}^N (\hat{l}_z^k + \hat{s}_z^k), \quad (4.65)$$

gdje  $\hat{s}_x^k, \hat{s}_y^k, \hat{s}_z^k$  označavaju projekcije spina  $k$ -te čestice na odgovarajuće koordinatne ose. Operatori spina su predstavljeni  $2 \times 2$  Paulijevim matricama. Ako nisu prisutna vanjska elektromagnetna polja i ako ne djeluju sile koje su povezane sa spinom zakon očuvanja ugaonog momenta i dalje vrijedi jer hamiltonijan komutira sa svakom komponentom operatora  $\hat{s}^k$ .

Komutacione relacije ukupnog ugaonog momenta sistema čestica odgovaraju onima koje vrijede za orbitalni ugaoni moment. Naime, operatori  $\hat{l}_x^k, \hat{l}_y^k, \hat{l}_z^k, \hat{s}_x^k, \hat{s}_y^k$  i  $\hat{s}_z^k$  komutiraju za različite indekse čestica,  $i$ , štaviše,  $\hat{l}_i^k$  i  $\hat{s}_j^k$  komutiraju međusobno zato što operator  $\hat{l}_i^k$  djeluje u koordinatnom a operator u  $\hat{s}_j^k$  spinskom prostoru. Dakle, vrijede relacije:

$$[\hat{j}_x, \hat{j}_y] = i\hbar\hat{j}_z, \quad [\hat{j}_y, \hat{j}_z] = i\hbar\hat{j}_x, \quad [\hat{j}_z, \hat{j}_x] = i\hbar\hat{j}_y, \quad (4.66)$$

$$[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_x] = [\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_y] = [\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_z] = 0. \quad (4.67)$$

Vlastite vrijednosti operatora  $\hat{j}_z^k$  su jednake sumi vlastitih vrijednosti operatora  $\hat{l}_z^k$  i  $\hat{s}_z^k$ . Vlastita vrijednost  $z$  komponente orbitalnog ugaonog momenta

je  $\tilde{m}_z^k \hbar$ , sa  $-l^k \leq \tilde{m}_z^k \leq l^k$  ( $l^k = 0, 1, 2, \dots$  je kvantni broj orbitalnog ugaonog momenta  $k$ -te čestice). Vlastita vrijednost spina je  $\pm \hbar/2$ . Vlastite vrijednosti operatora  $\hat{j}_z^k$  označit ćemo sa  $\hbar m_z^k$ , gdje su  $m_z^k$  jednaki cjelobrojnom umnošku  $1/2$  (za čestice sa spinom  $1/2$ ). Za  $z$  komponentu ukupnog ugaonog momenta vrijedi:

$$j_z = \sum_{k=1}^N \hbar m_z^k = \hbar m, \quad m = \sum_{k=1}^N m_z^k. \quad (4.68)$$

Ova jednačina se može posmatrati kao jednačina za vlastite vrijednosti. Pri tome smo izostavili indeks  $z$  na  $m$ . Da bismo odredili vlastite vrijednosti operatora  $\hat{\mathbf{j}}^2$  uvodimo zajedničke vlastite funkcije  $|jm\rangle$  od operatora  $\hat{\mathbf{j}}^2$  i  $\hat{j}_z$  pomoću relacija:

$$\hat{\mathbf{j}}^2 |jm\rangle = J^2 |jm\rangle, \quad \hat{j}_z |jm\rangle = m |jm\rangle. \quad (4.69)$$

Ni  $J^2$  ni  $m$ , kao ni njihova veza, nam još nisu poznati. Da bismo ih našli uobičajeno je razmotriti operatore  $\hat{j}_+$  i  $\hat{j}_-$  koji su definisani sa:

$$\hat{j}_+ = \hat{j}_x + i\hat{j}_y, \quad \hat{j}_- = \hat{j}_x - i\hat{j}_y. \quad (4.70)$$

Koristeći komutacione relacije (4.66), lako se može provjeriti da vrijede sljedeće relacije:

$$[\hat{j}_+, \hat{j}_z] = [\hat{j}_x, \hat{j}_z] + i[\hat{j}_y, \hat{j}_z] = -i\hbar\hat{j}_y + i\hbar\hat{j}_x = -\hbar(\hat{j}_x + i\hat{j}_y) = -\hbar\hat{j}_+, \quad (4.71)$$

$$[\hat{j}_-, \hat{j}_z] = \hbar\hat{j}_-. \quad (4.72)$$

Komutacione relacije (4.71) i (4.72) možemo napisati u matričnoj formi tako što pomnožimo obje jednačine slijeva sa bra vektorom  $\langle jm'|$  a zdesna sa ket vektorom  $|jm''\rangle$  (pri tome biramo bazu u kojoj je  $\hat{j}_z$  dijagonalan:  $\hat{j}_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle$ ). Dobijamo:

$$(j_{\pm})_{m'm''} \hbar m'' - \hbar m' (j_{\pm})_{m'm''} = \mp \hbar (j_{\pm})_{m'm''}, \quad (4.73)$$

tj.

$$(j_{\pm})_{m'm''} (m'' - m' \pm 1) = 0. \quad (4.74)$$

Očito, jedini matrični elementi od  $\hat{j}_+$  i  $\hat{j}_-$  koji su različiti od nule su  $(j_+)_{m,m-1}$  i  $(j_-)_{m,m+1}$ . Operator kvadrata ukupnog ugaonog momenta se može izraziti pomoću operatora  $\hat{j}_z$  i operatora  $\hat{j}_+\hat{j}_-$  ili  $\hat{j}_-\hat{j}_+$  na sljedeći način:

$$\begin{aligned} \hat{j}_+\hat{j}_- &= (\hat{j}_x + i\hat{j}_y)(\hat{j}_x - i\hat{j}_y) = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 - i\hat{j}_x\hat{j}_y + i\hat{j}_x\hat{j}_y = \hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 + \hbar\hat{j}_z, \\ \hat{j}_-\hat{j}_+ &= \hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 - \hbar\hat{j}_z. \end{aligned} \quad (4.75)$$

Kompletirajući kvadrate dobijamo:

$$\hat{j}_+\hat{j}_- = \hat{\mathbf{j}}^2 + \frac{\hbar^2}{4} - \left(\hat{j}_z - \frac{\hbar}{2}\right)^2, \quad \hat{j}_-\hat{j}_+ = \hat{\mathbf{j}}^2 + \frac{\hbar^2}{4} - \left(\hat{j}_z + \frac{\hbar}{2}\right)^2. \quad (4.76)$$

Razmatrajući dijagonalne matrične elemente  $\langle jm | \dots | jm \rangle$  dobijamo:

$$\begin{aligned} \left(\hat{j}_+\hat{j}_-\right)_{mm} &= \langle jm | \hat{j}_+\hat{j}_- | jm \rangle = \langle jm | \hat{j}_+ \sum_{m'} | jm' \rangle \langle jm' | \hat{j}_- | jm \rangle \\ &= \sum_{m'} (j_+)_{m,m'} (j_-)_{m',m} = (j_+)_{m,m-1} (j_-)_{m-1,m} \\ &= J^2 + \frac{\hbar^2}{4} - \hbar^2 \left(m - \frac{1}{2}\right)^2, \\ \left(\hat{j}_-\hat{j}_+\right)_{mm} &= (j_-)_{m,m+1} (j_+)_{m+1,m} = J^2 + \frac{\hbar^2}{4} - \hbar^2 \left(m + \frac{1}{2}\right)^2. \end{aligned} \quad (4.77)$$

Pretpostavljamo da je  $J^2$  dati (ali još uvijek nepoznati) pozitivni broj. Sa  $m'$  ćemo označiti najnižu moguću vrijednost  $m$ , a sa  $m''$  maksimalnu vrijednost  $m$ . Iz (4.77), koristeći relacije:

$$(j_+)_{m',m'-1} = 0 = (j_-)_{m'-1,m'} \quad \text{i} \quad (j_-)_{m'',m''+1} = 0 = (j_+)_{m''+1,m''},$$

dobijamo:

$$J^2 + \frac{\hbar^2}{4} = \hbar^2 \left(m' - \frac{1}{2}\right)^2, \quad J^2 + \frac{\hbar^2}{4} = \hbar^2 \left(m'' + \frac{1}{2}\right)^2,$$

tako da je

$$m' = \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{J^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}}, \quad m'' = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{J^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}}. \quad (4.78)$$

U jednačini za  $m'$  izabrali smo negativni predznak ispred korijena da bismo dobili najnižu moguću vrijednost za  $m'$ . Razlika  $m'' - m' + 1$  je cijeli broj koji je jednak broju mogućih  $z$  projekcija ukupnog ugaonog momenta  $\mathbf{j}$ . Po analogiji sa orbitalnim ugaonim momentom možemo označiti:  $m'' - m' + 1 = 2j + 1$ . Tada je, na osnovu (4.78):

$$2j + 1 = 2\sqrt{\frac{J^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}} \implies J^2 = \hbar^2 j(j + 1). \quad (4.79)$$

Pošto  $z$  projekcija ukupnog ugaonog momenta  $m$  mora imati jednak broj pozitivnih i negativnih vrijednosti, to  $m''$  mora biti jednako  $-m'$ . Tada, na osnovu  $m'' - m' + 1 = 2j + 1$ , dobijamo:

$$\begin{aligned} |m| \leq j \quad \text{sa} \quad m &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm j, \quad \text{ili} \\ m &= \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm j. \end{aligned} \quad (4.80)$$

Dakle, dokazana je slijedeća veza operatora ukupnog ugaonog momenta i vlastitih vrijednosti:

$$\hat{\mathbf{j}}^2 \rightarrow \hbar^2 j(j+1) \quad (4.81)$$

$$\hat{j}_z \rightarrow \hbar m, \quad |m| \leq j. \quad (4.82)$$

Zavisno od broja čestica i spina,  $j$  poprima ili cjelobrojne vrijednosti  $0, 1, 2, \dots$ , ili cjelobrojne umnoške od  $\frac{1}{2}$ , tj.  $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$ . Za projekcije ukupnog ugaonog momenta  $m$  dobijamo  $2j + 1$  mogućih orijentacija u odnosu na proizvoljnu osu (ovdje  $z$  osu):  $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ . Pošto je spin elektrona  $1/2$  za sistem koji se sastoji od parnog broja elektrona,  $j$  poprima cjelobrojne vrijednosti, dok je za neparan broj elektrona  $j$  jednak cjelobrojnom umnošku od  $1/2$ .

Za određivanje vlastitih vrijednosti u (4.81) i (4.82) koristili smo samo komutacione relacije (4.66) i (4.67). Zbog toga što operatori ukupnog ugaonog momenta  $\hat{\mathbf{l}}$  i spina  $\hat{\mathbf{s}}$  zadovoljavaju iste komutacione relacije, možemo izvesti analogne relacije za vlastite vrijednosti odgovarajućih operatora:

$$\hat{\mathbf{l}} = \sum_{k=1}^N \hat{\mathbf{l}}^k, \quad (4.83)$$

$$\hat{l}^2 \rightarrow \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.84)$$

$$\hat{l}_z \rightarrow \hbar m_l, \quad |m_l| \leq l, \quad (4.85)$$

$$\hat{\mathbf{s}} = \sum_{k=1}^N \hat{\mathbf{s}}^k, \quad (4.86)$$

$$\hat{s}^2 \rightarrow \hbar^2 s(s+1), \quad s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots, \quad (4.87)$$

$$\hat{s}_z \rightarrow \hbar m_s, \quad |m_s| \leq s. \quad (4.88)$$

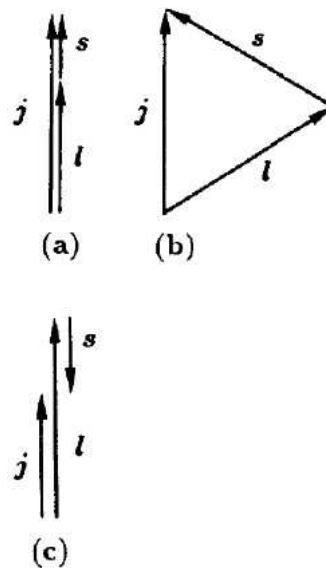
Za date vrijednosti ukupnog ugaonog momenta  $\mathbf{l}$  i ukupnog spina  $\mathbf{s}$ , totalni ugaoni moment  $\mathbf{j}$  poprima, zavisno od relativne orijentacije  $\mathbf{l}$  i  $\mathbf{s}$ , sve vrijednosti između  $|l - s|$  (za antiparalelnu orijentaciju; vidjeti sliku 4.4) i  $l + s$  (za paralelnu orijentaciju):

$$j = l + s, |l + s - 1|, \dots, |l - s|. \quad (4.89)$$

Stanja sa istim vrijednostima  $l$  i  $s$  formiraju grupu nivoa koja se naziva *multiplet*. Vrijednosti energija koje odgovaraju tim stanjima su međusobno jako bliske zbog slabe  $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$  interakcije. Iz relacije (4.89) slijedi da za  $s \leq l$  multiplet sadrži  $2s + 1$  stanja. Vrijednosti  $j$ ,  $l$  i  $s$  karakterišu energiju cijelog atoma. Pored ovih, u zavisnosti od razmatranog problema, pojavljuju se



dodatni kvantni brojevi. Primjer je glavni kvantni broj u slučaju atoma vodonika. Za višečestične sisteme pojavljuju se i drugi karakteristični kvantni brojevi. Po analogiji sa atomom vodonika, termini sa  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$  se označavaju velikim slovima S, P, D, F,  $\dots$  sa odgovarajućim indeksima. Donji indeks na desnoj strani pokazuje vrijednost  $j$ , dok gornji indeks na lijevoj strani pokazuje broj stanja u multipletu. Npr.  ${}^2P_{1/2}$  označava term sa  $l = 1$ ,  $j = \frac{1}{2}$ ,  $s = \frac{1}{2}$ , ( $2s + 1 = 2 \times \frac{1}{2} + 1 = 2$ ),  ${}^4F_{3/2}$  označava term sa  $l = 3$ ,  $j = \frac{3}{2}$ ,  $s = \frac{3}{2}$  ( $2 \times \frac{3}{2} + 1 = 4$ ) itd.



Slika 4.4: Slaganje orbitalnog  $l$  i spinskog  $s$  ugaonog momenta u slučaju maksimalnog [slika (a)] i minimalnog [slika (c)] ugaonog momenta. Slika (b) ilustruje međuslučaj.

## 4.5 Male oscilacije višečestičnog sistema

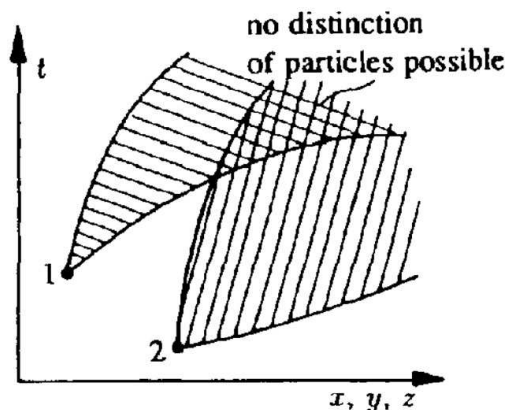


# Poglavlje 5

## Identične čestice

### 5.1 Uvod

Jedna od karakteristika kvantne mehanike je nerazlikovanje identičnih čestica na subatomskom nivou. *Identičnim česticama* nazivamo one čestice koje imaju istu masu, naboj, spin itd. i koje se ponašaju na isti način pod istim fizikalnim uslovima. Zbog toga, nasuprot makroskopskim objektima, nije moguće razlikovanje među česticama kao što su elektroni (protoni, pioni,  $\alpha$  čestice) preko karakteristika njihovih trajektorija. Širenje talasnih



Slika 5.1: Šematski prikaz preklapanja gustoća vjerovatnoća. U početku se talasni paketi čestica 1 i 2 pripreme odvojeno. U toku vremena, uslijed prostiranja talasnih paketa koji odgovaraju česticama 1 i 2, dolazi do njihovog preklapanja i nije više moguće razlikovati čestice.

paketa koji opisuju čestice vodi do preklapanja gustoća vjerovatnoće u vremenu (Slika 5.1); zato kasnije nećemo moći utvrditi da li se čestica broj 1 ili čestica broj 2 ili neka druga može naći u određenoj tački u prostoru  $\mathbf{r}$ .

Zbog moguće interakcije između čestica, pri kojoj može doći npr. do izmjene impulsa, ni dinamičke osobine se ne mogu koristiti za razlikovanje čestica.

Dakle, ako posmatramo kvantno-mehanički sistem identičnih čestica, nećemo moći pripisati stanje  $\psi_n$  čestici broj  $n$ . Moći ćemo samo odrediti stanje cijelog sistema čestica.

U slučaju sistema od  $N$  čestica sa spinom, talasna funkcija sistema je funkcija od ovih  $4N$  koordinata ( $3N$  prostornih i  $N$  spinskih koordinata):

$$\psi = \psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_N s_N, t). \quad (5.1)$$

Pošto se sistem sastoji od identičnih čestica, fizikalno stanje ostaje nepromijenjeno ako se izmijene čestice  $j$  i  $i$ . Ovu operaciju možemo izvršiti pomoću operatora  $\hat{P}_{ij}$ :

$$\begin{aligned} & \hat{P}_{ij} \psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_i s_i, \dots, \mathbf{r}_j s_j, \dots, \mathbf{r}_N s_N, t) \\ &= \lambda \psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_j s_j, \dots, \mathbf{r}_i s_i, \dots, \mathbf{r}_N s_N, t), \end{aligned} \quad (5.2)$$

gdje je, za sada,  $\lambda$  proizvoljni konstantni faktor. Druga izmjena čestica  $i$  i  $j$  vraća nas na prvobitno stanje, tako da je

$$\hat{P}_{ij}^2 \psi = \lambda^2 \psi = \psi \quad (5.3)$$

i imamo dvije moguće vrijednosti za  $\lambda$ :

$$\lambda = \pm 1. \quad (5.4)$$

S obzirom da ispitujemo sisteme identičnih čestica, izmjena čestica uvijek djeluje na isti način na talasnu funkciju. Ovo znači da mogu postojati dvije vrste sistema čestica: sistemi sa talasnim funkcijama koje mijenjaju predznak uslijed izmjene dviju čestica, i sistemi čije talasne funkcije pri toj izmjeni ostaju nepromijenjene. Zato vrijedi:

$$\text{ili je } \hat{P}_{ij} \psi_s = \psi_s \quad \text{ili} \quad \hat{P}_{ij} \psi_a = -\psi_a. \quad (5.5)$$

Talasnu funkciju  $\psi_s$  sa vlastitom vrijednošću  $+1$  nazivamo *simetričnom* a talasnu funkciju  $\psi_a$  sa vlastitom vrijednošću  $-1$  nazivamo *antisimetričnom* u odnosu na izmjenu dviju čestica. Otuda porijeklo indeksa  $s$  i  $a$  u jednačini (5.5). Da li su čestice opisane simetričnom ili antisimetričnom talasnom funkcijom, zavisit će od njihove prirode. Prelaz između simetričnih i antisimetričnih stanja nije moguć. To je zbog toga što je interakcija između čestica simetrična u odnosu na njihovu zamjenu:

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) = V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (5.6)$$

tako da su matrični elementi koji odgovaraju prelazu između simetričnih i antisimetričnih stanja uslijed te interakcije jednaki nuli:

$$\langle \psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) | V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) | \psi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) \rangle = 0. \quad (5.7)$$

Obje vrste čestica se pojavljuju u prirodi. Čestice opisane pomoću antisimetrične talasne funkcije nazivamo *fermionima* (po E. Fermiju), a one opisane simetričnom talasnom funkcijom nazivamo *bozonima* (po S. N. Boseu).

Fizikalni kriterij razlikovanja dviju čestica je njihov spin: *fermioni imaju polucjelobrojni spin, a bozoni imaju cjelobrojni spin*. Ova veza između spina i osobina simetrije valne funkcije ili, kako se još naziva, veza između *spina i statistike* je najprije otkrivena empirijski. Kvantna teorija polja daje strožiju teorijsku formulaciju te veze i omogućava da se razumije zašto to mora biti tako.

Primjeri fermiona su elektroni, protoni, neutroni, neutrini, jezgra  $C^{13}$  itd. (svi sa spinom  $\frac{1}{2}$ ). Primjeri bozona su  $\pi$  mezoni (spin 0), fotoni (spin 1), deuteroni (spin 1),  $\alpha$  čestice (spin 0), jezgre kisika (spin 0). Za čestice koje se sastoje od više elementarnih čestica, spin također određuje karakter statistike. Npr.  $\alpha$  čestica, koja se sastoji od 4 nukleona sa spinom  $\frac{1}{2}$ , ima spin 0 i ona je bozon (izmjena  $\alpha$  čestica zahtijeva izmjenu dva protona i dva neutrona, tako da se kompenzuju negativni predznaci uslijed izmjene fermiona).

## 5.2 Paulijev princip

Antisimetričnost fermionske talasne funkcije je ekvivalentna *Paulijevom principu isključivosti* (isključenja, zabrane), koji je empirijski formulisao *Wolfgang Pauli* 1925. godine, kada je istraživao atomski spektar. Prema tom principu, u određenom kvantno-mehaničkom stanju se može nalaziti samo jedan elektron. Sada ćemo malo preciznije i detaljnije specificirati ovu jednostavnu formulaciju Paulijevog principa. Na osnovu rezultata prethodnog odjeljka znamo da je samo stanje sistema elektrona kao cjeline, a ne i stanje pojedinačnih elektrona, dobro definisano. Prema tome, stanje atoma, kao višeelektronskog sistema, će se sigurno promijeniti ako se drugi elektron stavi u elektronski omotač ili ako se atom jonizuje.

Ove poteškoće ćemo moći izbjeći ako usmjerimo pažnju na proces mjerenja primijenjen na elektronu. Znamo da elektron ima četiri stepena slobode (uzimamo u obzir i stepen slobode koji dolazi od spina), tako da je njegovo stanje karakterisano sa četiri nezavisna broja. Uobičajeno je da se kao veličine koje odgovaraju tim stepenima slobode izaberu energija, ugaoni moment,  $z$

komponenta ugaonog momenta i  $z$  komponenta spina elektrona. Ovaj skup veličina odgovara kvantnim brojevima  $n, l, m_l$  i  $m_s$  (moguće je izabrati i neki drugi skup veličina, npr. tri komponente impulsa i  $z$  komponentu spina), tako da je talasna funkcija elektrona određena sa tim kvantnim brojevima:

$$\psi = \psi_{nlm_l m_s}. \quad (5.8)$$

Sada možemo formulirati Paulijev princip u nešto preciznijem obliku: u sistemu elektrona, pri istovremenom mjerenju četiriju veličina koje su tipične za elektron (npr. kvantnih brojeva  $n, l, m_l$  i  $m_s$ ) kao rezultat možemo dobiti samo jednu tačno određenu vrijednost (za taj skup brojeva) za jedan elektron. Dva elektrona se nikad ne mogu istovremeno nalaziti u stanju (5.8). U narednim odjeljcima ćemo se uvjeriti da je ovako formulisan Paulijev princip posljedica antisimetrije talasne funkcije opisane sa (5.5). Kako je ovaj empirijski utvrđen princip posljedica antisimetrije fermionske talasne funkcije, Paulijev princip vrijedi ne samo za elektrone, već i za sve fermione.

### 5.3 Izmjenska degeneracija

Razmatrat ćemo sistem od  $N$  identičnih čestica bez ikakve interakcije, uz napomenu da, i ako bismo uzeli u obzir interakcije, to ne bi promijenilo nijedan od fundamentalnih zaključaka do kojih ćemo doći. Schrödingerova jednačina za takav sistem ima slijedeći oblik:

$$\left( \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \dots + \hat{H}_N \right) \psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_N s_N) = E \psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_N s_N). \quad (5.9)$$

Jednočestični hamiltonijani  $\hat{H}_i(\mathbf{r}_i, s_i)$  se mogu međusobno razlikovati po činjenici da djeluju na različite čestice. Ako označimo  $i$ -tu vlastitu funkciju čestice  $k$  sa  $\varphi_i(\mathbf{r}_k, s_k)$ , za problem vlastite vrijednosti jedne čestice imamo:

$$\hat{H}_k(\mathbf{r}_k, s_k) \varphi_i(\mathbf{r}_k, s_k) = E_i \varphi_i(\mathbf{r}_k, s_k), \quad k = 1, 2, \dots, N; \quad i = 1, 2, \dots \quad (5.10)$$

Rješenje Schrödingerove jednačine (5.9) se onda može napisati kao proizvod talasnih funkcija pojedinačnih čestica:

$$\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_N s_N) = \varphi_{i_1}(\mathbf{r}_1, s_1) \varphi_{i_2}(\mathbf{r}_2, s_2) \dots \varphi_{i_N}(\mathbf{r}_N, s_N). \quad (5.11)$$

Brojevi  $i_j$  ( $j = 1, 2, \dots, N$ ) su specijalni brojevi koji karakterišu vlastite funkcije. Ako ima  $n_i$  čestica u stanju  $\varphi_i$ , onda ćemo za vlastitu vrijednost ukupne energije dobiti:

$$E = \sum_i n_i E_i \quad \text{sa} \quad \sum_i n_i = N. \quad (5.12)$$

Zbog nerazlikovanja čestica, nismo u mogućnosti da kažemo koja je čestica u kojem stanju. Ovo znači da postoji  $N!/(n_1!n_2!n_3!\dots)$  kombinacija talasnih funkcija pojedinačnih čestica u (5.11) koje daju istu vlastitu vrijednost energije  $E$ . Ovo se naziva *izmjenjska degeneracija*.

Izmjenjska degeneracija se uklanja zahtjevom da talasna funkcija bude simetrična za bozone, odnosno antisimetrična za fermione.<sup>1</sup> Zapravo, cijeli prostor funkcija čije su bazne funkcije vlastite funkcije energije  $E$  sadrži samo *jednu simetričnu* i *jednu antisimetričnu* talasnu funkciju. Simetrična talasna funkcija za bozone se dobija kao suma svih mogućih  $N!$  permutacije argumentata jednočestičnih talasnih funkcija u (5.11). Ako permutacije označimo sa  $P$ , onda talasna funkcija sistema bozona zajedno sa faktorom normiranja  $(N!n_1!n_2!\dots)^{-1/2}$  glasi:

$$\psi_{\text{bozon}} = \frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!\dots}} \sum_{P=1}^{N!} P \varphi_{i_1}(\mathbf{r}_1, s_1) \varphi_{i_2}(\mathbf{r}_2, s_2) \dots \varphi_{i_N}(\mathbf{r}_N, s_N). \quad (5.13)$$

Ovdje smo pretpostavili da su jednočestične talasne funkcije ortonormirane.

## 5.4 Slaterova determinanta

Za antisimetričnu talasnu funkciju je općenito prihvaćeno da ju je najbolje predstaviti u formi determinante. Slaterova determinanta je  $N \times N$  determinanta koja se sastoji od proizvoda jednočestičnih talasnih funkcija koji je uređen na slijedeći način:

$$\psi_{\text{fermion}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{i_1}(\mathbf{r}_1, s_1) & \varphi_{i_2}(\mathbf{r}_1, s_1) & \dots & \varphi_{i_N}(\mathbf{r}_1, s_1) \\ \varphi_{i_1}(\mathbf{r}_2, s_2) & \varphi_{i_2}(\mathbf{r}_2, s_2) & \dots & \varphi_{i_N}(\mathbf{r}_2, s_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{i_1}(\mathbf{r}_N, s_N) & \varphi_{i_2}(\mathbf{r}_N, s_N) & \dots & \varphi_{i_N}(\mathbf{r}_N, s_N) \end{vmatrix}. \quad (5.14)$$

Zapazite da svaka kolona uvijek sadrži istu jednočestičnu talasnu funkciju, dok svaki red sadrži isti argument u jednočestičnoj talasnoj funkciji.

Predstavljanje fermionske talasne funkcije u obliku determinante na elegantan način osigurava da ta funkcija ima tražene osobine. Naime, međusobnom izmjenom dviju čestica, tj. izmjenom dvaju redova determinante, mijenja se predznak talasne funkcije. Nadalje, funkcija će biti jednaka nuli

<sup>1</sup>Ovaj zahtjev se nekad formuliše kao jedan dodatni postulat u kvantnoj mehanici - postulat o identičnim česticama. Pogledati npr.: F. Herbut, Kvantna mehanika za istraživače, Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu, 1999.

ako se dvije čestice nalaze u istom stanju, tj. ako su dvije kolone determinante istovjetne. Ovo je upravo Paulijev princip! Dakle, Paulijev princip je zaista posljedica antisimetričnosti talasne funkcije, što je fundamentalan rezultat.