

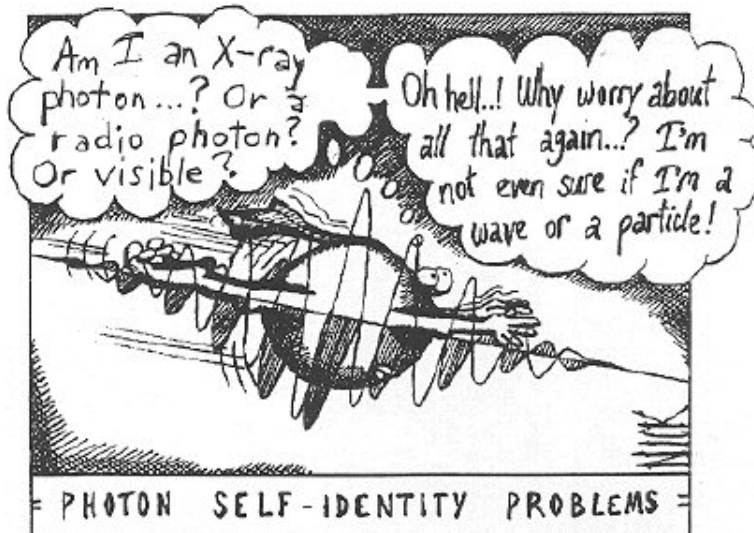
UNIVERZITET U BEOGRADU
FIZIČKI FAKULTET

Lekcije iz kvantne mehanike

UDŽBENIK SA ZBIRKOM REŠENIH ZADATAKA

MAJA BURIĆ
DUŠKO LATAS

BEOGRAD, 2019.



SADRŽAJ

Sadržaj	1
1 Uvertira: istorijski uvod	7
1.1 Jednačine klasične mehanike	7
1.2 Elektromagnetno polje i interferencija	10
1.3 Boltzmann-ova raspodela	13
1.4 Zračenje crnog tela	15
1.5 Fotoefekat	18
1.6 Compton-ov efekat	20
1.7 Linijski spektri i model atoma	21
1.8 Talasno-čestični dualizam	24
1.9 Schrödinger-ova jednačina	25
1.10 Zadaci	26
2 Jednodimenzioni sistemi	31
2.1 Harmonijski oscilator	31
2.2 Vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina	35
2.3 Jednačina kontinuiteta	37
2.4 Slobodna čestica	38
2.5 Evolucija slobodnog Gauss-ovog paketa	40
2.6 Rasejanje na potencijalnoj barijeri, koeficijenti R i T	44
2.7 Potencijalne jame	48
2.8 Osobine jednodimenzionih sistema	53

2.9	Kronig-Penney-jev model	55
2.10	WKB aproksimacija	58
2.11	Dodatak	62
	Hermité-ovi polinomi	63
	Fourier-ova transformacija	64
	Poisson-ovi integrali i gama funkcija	65
2.12	Zadaci	67
3	Intermeco: formalizam	75
3.1	Kinematika kvantne mehanike	77
3.2	Opservable i merenja	79
3.3	Hilbert-ov prostor	81
3.4	Matrica gustine	84
3.5	Relacije neodređenosti	86
3.6	Operatori koordinate i impulsa	87
3.7	Kanonsko kvantovanje	90
3.8	Dinamika kvantne mehanike	94
3.9	Schrödinger-ova i Heisenberg-ova slika	96
3.10	Operatori kreacije i anihilacije	97
3.11	Dodatak	101
	Vektorski prostor	101
	Linearni operatori	103
3.12	Zadaci	105
4	Trodimenzioni sistemi	115
4.1	Orbitni ugaoni moment	115
4.2	Čestica u sferno simetričnom potencijalu	120
4.3	Atom vodonika	121
4.4	Čestica u elektromagnetnom polju	124
4.5	Landau-ov problem	126
4.6	Dodatak	128
	Legendre-ovi polinomi	129
	Sferni harmonici	129
	Laguerre-ovi polinomi	130
4.7	Zadaci	132
5	Simetrije	139
5.1	Simetrije i zakoni održanja	140
5.2	Prostorne simetrije u kvantnoj mehanici	143
5.3	Algebra ugaonog momenta	147
5.4	Spin 1/2	148
5.5	Prostor stanja elektrona	151
5.6	Sabiranje ugaonih momenata	153
5.7	Identične čestice	158
5.8	$SO(4)$ i simetrije vodonikovog atoma	163
5.9	Izospin	165
5.10	Dodatak	169
	Grupe i reprezentacije grupa	169
	Izometrije euklidskog prostora	171
	Wigner-Eckart-ova teorema	172

5.11	Zadaci	174
6	Varijacije: kovarijantnost	181
6.1	Inverzija vremena i Galilei-jeve transformacije	182
6.2	Fazna transformacija	184
6.3	Efekat Aharonova i Bohm-a	185
6.4	Zadaci	189
7	Finale: približne metode	191
7.1	Stacionarna teorija perturbacija	191
7.2	Varijacioni metod	197
7.3	Vremenski zavisna perturbacija	202
7.4	Rezonanca u sistemu sa dva nivoa	204
7.5	Periodična perturbacija	206
7.6	Dipolni prelazi u atomu	207
7.7	Teorija rasejanja	209
7.8	Green-ova funkcija za slobodnu česticu	212
7.9	Metod parcijalnih talasa	216
7.10	Rezonance	221
7.11	Dodatak	224
	Bessel-ove funkcije	224
	Sferne Bessel-ove funkcije	225
7.12	Zadaci	226
II	Rešenja zadataka	231
1	Uvertira: istorijski uvod	233
2	Jednodimenzioni sistemi	247
3	Intermeco: formalizam	299
4	Trodimenzioni sistemi	347
5	Simetrije	387
6	Varijacije: kovarijantnost	427
7	Finale: približne metode	431

PREDGOVOR

Kvantna mehanika nije stvorena ni brzo ni lako, ili kako Peebles u uvodu u svoj udžbenik kaže, "teorija nije direktno izvedena iz merenja niti predstavlja jedno teorijsko otkriće, već je nastajala u komplikovanoj interakciji eksperimentalnih nagoveštaja, teorijskih uvida i sreće, uz mnoštvo pogrešnih pokušaja"¹. Stvaranje ove teorije trajalo je skoro pedeset godina a njen začetak u eksperimentu vezuje se za otkrića zakona zračenja crnog tela (Stefan, 1879), fotoefekta (Hertz, 1887) i atomskih spektara (Balmer, 1885). Razvoj odgovarajućih teorijskih ideja bio je relativno spor a prve korake napravili su Planck (1901), Einstein (1905) i Bohr (1913). Konačno, de Broglie-va ideja o talasno-čestičnom dualizmu (1924) pomogla je da se formalizam iskristališe: 1925. otkrivena je matrična mehanika (Heisenberg), 1926. Schrödinger-ova jednačina, a 1928. njen relativistički analogon, Dirac-ova jednačina. Kao i u vreme stvaranja Newton-ove mehanike, deo potrebne matematike je istraživani i precizno formulisani praktično istovremeno: knjiga Courant-a i Hilbert-a objavljena je 1924. a Frank-a i von Mises-a 1925².

Relativno dugačak razvoj do zaokruženja kvantne mehanike uslovljen je njenom "kontra-intuitivnošću" stanovišta klasične fizike odnosno klasične intuicije, koja se ogleda pre svega u diskretnosti fizičkih veličina i principijelnoj nemogućnosti njihovog istovremenog merenja. I matematički okvir u kome kvantna mehanika opisuje realnost potpuno je različit od klasičnog. Jedan od njegovih elemenata je da se fizički sistem opisuje funkcijama stanja koje imaju strukturu kompleksnog vektorskog prostora i što je posebno važno, nisu direktno merljive. Sa druge strane, rezultati merenja fizičkih opservabli su inherentno statistički. Obe osobine se drastično razlikuju od klasične mehanike u kojoj je poznavanje stanja sistema (čestice) isto što i poznavanje vrednosti njenog položaja i impulsa ili nekih drugih veličina kao što su energija i moment impulsa. Ideja da su stanja sistema vektori u apstraktnom prostoru je suština kvantovanja, a jedna od njenih važnih posledica je novi pristup u opisu simetrija. Koncepti kvantovanja i reprezentovanja simetrija spadaju u najvažnija otkrića moderne fizike i predstavljaju osnovu našeg današnjeg razumevanja zakona prirode.

Da bismo pokazali kako se kvantnomehanički opis ipak prirodno razvio iz klasične fizike odlučili smo se da kvantnu mehaniku uvedemo na kvaziistorijski i induktivan način. Tome nije razlog samo to što važni istorijski eksperimenti i izvođenja treba da se vide i "prođu" bi se usvojili, nego i to što je studentima, osim znanja matematičkog formalizma, potrebno da razumeju zašto je on uveden. A možda pre svega, da se na njega naviknu.

U prvoj glavi knjige dat je istorijski uvod u predmet: pregled važnih eksperimenata, kao i evolucija teorijskog razmišljanja koje je dovelo do formulacije ideje kvantovanja. U drugoj glavi, koja služi da se izgradi intuicija i upoznaju osnovni kvantni fenomeni, opisani su najjednostavniji sistemi u jednoj i dve dimenzije. Između opisa jednodimenzionih i trodimenzionih sistema koji je dat u četvrtoj glavi, napravljen je intermeo: treća glava u kojoj se preciznije uvodi matematički formalizam. Peta i šesta glava posvećene su simetrijama i u njima su uvedeni neki od važnih pojmova kao što su spin, izospin i identične čestice. Na kraju je, finale: u

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

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

sedmoj glavi prikazane su neke od klasičnih približnih metoda kvantne mehanike koje omogućuju njenu primenu na realne fizičke sisteme. Na kraju svake glave dati su zadaci koji ilustruju osnovni tekst i treba da pomognu da se izloženi materijal usvoji. Vodeći se idejom da je rešavanje problema sastavni deo učenja, zadaci su detaljno rešeni u drugom delu knjige koji je u mnogim aspektima komplementaran prvom. Najveći broj zadataka rešen je "pešački", dok je u nekima pokazano kako se do rešenja može doći pomoću programa *Mathematica*TM.

Udžbenik je nastao zaokruživanjem i malim proširivanjem predavanja i vežbi koje su držane na dva kursa kvantne mehanike: na osnovnom, za studente nastavnog smera i astrofizike, i na naprednom, za studente istraživačkog smera Fizičkog fakulteta Univerziteta u Beogradu. Neke lekcije na ova dva kursa su se poklapale, neke ne: nadamo se ipak da u knjizi postoji konceptualno, metodološko i stilsko jedinstvo ("jedinstvo mesta, vremena i radnje"), i da smo uspeli da spojimo jednostavne i komplikovanije sadržaje. Doduše, ovakvim postupkom su neke teme, koje su sastavni deo kursa na istraživačkom smeru kao što je detaljnija analiza višestetičnih sistema i kvantnih korelacija, izostavljene, a neke su prvo uvedene na elementarnom nivou a tek kasnije razrađene. Odustali smo ipak od početne ideje da teže od lakših delova razdvojimo stavljanjem zvezdica, uvereni da studenti znaju šta (treba da) uče. U svakom slučaju, treba imati u vidu da je udžbenik unija dva skupa i da nekom konkretnom kursu kvantne mehanike po svoj prilici odgovara konkretni izbor lekcija, tj. poglavlja ove knjige.

I na kraju posveta: jedna od ideja na početku pisanja je bila da napravimo tekst u nekoj meri komplementaran udžbeniku profesora Fedora Herbuta *Kvantna mehanika za istraživače* (PMF Beograd, 1983) i time, i na našem jeziku, kompletiramo različite pristupe u predavanju ovog predmeta. Fedorova knjiga je divan, inspirativan kurs koji je kod nas (kao i kod generacija beogradskih studenata) probudio interes za modernu teorijsku fiziku. Osim nje, za kurs sličnog ili nešto većeg obima preporučujemo klasike:

- S. Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, 2013.
- J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 1994.
- P. J. E. Peebles, *Quantum Mechanics*, Princeton University Press, 1992.
- D. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, 1982.
- E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, Wiley, 1970.
- A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North-Holland 1967, i naravno
- L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, Elsevier, 1977.

Nadamo se da će ovaj tekst pomoći studentima da nauče i zavole kvantnu mehaniku, da upoznaju zakonitosti koji opisuju kvantne fenomene i da razviju specifičnu intuiciju, različitu od klasične. Pred njima je zadatak otkrivanja, posao koliko izazovan toliko i zanimljiv.

Beograd, decembra 2017.

M. B. i D. L.

UVERTIRA: ISTORIJSKI UVOD

Nauka koje je obeležila dvadeseti vek bez sumnje je fizika, a najvažnija otkrića fizike u prvoj polovini dvadesetog veka su kvantna mehanika i teorija relativnosti. Dolazak obe teorije najavljen je krajem devetnaestog veka eksperimentima koji se nisu mogli objasniti konceptima i matematičkim aparatom klasične fizike. Specijalna teorija relativnosti nastala je, u tom smislu, iz Michelson-Morley-jevog eksperimenta, a kvantna mehanika je počela eksperimentima o emisionom spektru crnog tela, linijskim spektrima atoma, fotoefektu i Compton-ovom efektu: o njima će biti reči u ovoj glavi. Ti eksperimenti zapravo su odredili domen važenja klasične fizike odnosno ustanovili granice njene primenljivosti. Taj domen karakterišu dve skale: brzina svetlosti, $c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$ i Planck-ova konstanta, $\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$.

Pomenuli smo da je slika sveta koju daju kvantna mehanika i teorija relativnosti različita od klasične, što se često izražava formulisanjem paradoksa kao što su paradoks Schrödinger-ove mačke ili paradoks blizanca. Razume se, ni u prirodi ni u njenom korektnom opisu nema paradoksa. Stvar je u tome što naša intuicija o kretanju, bazirana na svakodnevnom iskustvu, ne može direktno da se ekstrapoliše na proizvoljno mala ili proizvoljno velika rastojanja, energije i brzine. Kvantna mehanika je jedna od eksperimentalno najbolje verifikovanih teorija, a bez nje se ne može razumeti gotovo nijedan fenomen u atomskoj, nuklearnoj ili fizici kondenzovanog stanja. Naravno i ona ima svoj domen važenja: nerelativistički.

Uloga ove glave nije samo da, da tako kažemo, postavi scenu i pripremi čitaoca za pojavu glavnog junaka: uvešćemo, za referencu, nekoliko osnovnih klasičnih koncepata i rezultata koji će se kasnije diskutovati i uopštiti.

1.1 Jednačine klasične mehanike

Podsetimo se Newton-ovog opisa mehanike: razmotrimo sistem koji se sastoji od nekoliko masivnih interagujućih čestica zanemarljive dimenzije, tzv. materijalnih tačaka. Materijalne tačke prebrojavamo indeksom $i = 1, 2, \dots, N$. Stanje sistema je u klasičnoj mehanici opisano položajima svih čestica \vec{r}_i i njihovim brzinama $\vec{v}_i = \dot{\vec{r}}_i = \frac{d\vec{r}_i}{dt}$. Promena stanja sistema odnosno njegovo kretanje dato je drugim Newton-ovim zakonom

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

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

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

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

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

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

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

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

minimalno na klasičnim trajektorijama.

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

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

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

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

odnosno za proizvoljnu fizičku veličinu A (koja je funkcija koordinata i impulsa, i eventualno, vremena) $A = A(q_i, p_i, t)$ imamo

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

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

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

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

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

Uzmimo kao najjednostavniji primer kretanje čestice u polju elastične sile, npr. kuglice mase m pričvršćene za oprugu koeficijenta elastičnosti $k = m\omega^2$. To kretanje opisuje Newton-ov zakon

$$m\ddot{x} = -kx. \quad (1.10)$$

Elastična sila je potencijalna, data potencijalnom energijom $U = \frac{1}{2} kx^2$, pa su lagranžijan i hamiltonijan sistema

$$L = \frac{1}{2} m\dot{x}^2 - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \quad H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \quad (1.11)$$

gde je impuls $p = m\dot{x}$. Kretanje čestice je harmonijsko odnosno rešenje jednačine (1.10) je periodično,

$$x(t) = x_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t = a \cos(\omega t + \varphi) \quad (1.12)$$

gde su x_0 i p_0 početne vrednosti koordinate i impulsa, a amplituda a φ faza oscilovanja, $x_0 = a \cos \varphi$, $p_0 = -m\omega a \sin \varphi$.

Drugi važan primer je kretanje čestice u polju centralne sile. Centralna sila je konzervativna i njen potencijal zavisi samo od rastojanja r od centra, $U = U(r)$, pa je problem kretanja najjednostavnije rešavati u sfernim koordinatama (r, θ, φ) : $x = r \sin \theta \cos \varphi$, $y = r \sin \theta \sin \varphi$, $z = r \cos \theta$. Lagranžijan je

$$L = T - U = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi}^2) - U(r), \quad (1.13)$$

a generalisani impulsi, $p_r = m\dot{r}$, $p_\theta = mr^2\dot{\theta}$ i $p_\varphi = mr^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi}$. Iz lagranžijana slede jednačine kretanja

$$\frac{d}{dt}(m\dot{r}) = m r \dot{\theta}^2 + m r \sin^2 \theta \dot{\varphi}^2 - \frac{dU}{dr} \quad (1.14)$$

$$\frac{d}{dt}(mr^2\dot{\theta}) = mr^2 \sin \theta \cos \theta \dot{\varphi} \quad (1.15)$$

$$\frac{d}{dt}(mr^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi}) = 0. \quad (1.16)$$

Odmah se vidi da je, pošto ugaona koordinata φ ne figuriše eksplicitno u lagranžijanu, impuls p_φ konstanta kretanja, (1.16). Ovu konstantu izborom koordinatnog sistema možemo da fiksiramo da bude nula,

$$p_\varphi = mr^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi} = 0, \quad (1.17)$$

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

$$p_\theta = mr^2 \frac{d\theta}{dt} = L. \quad (1.18)$$

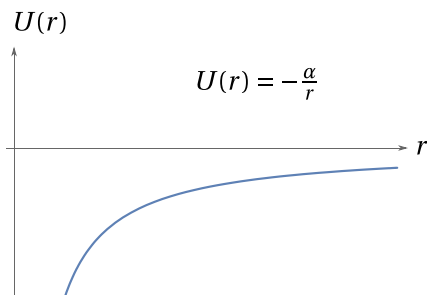
Zapravo, u polju centralne sile vektor momenta impulsa \vec{L} je konstanta kretanja, što odgovara održanju generalisanih impulsa p_φ i p_θ : normala na ravan $\varphi = \text{const}$ daje pravac vektora \vec{L} , a p_θ njegovu apsolutnu vrednost, L . Netrivijalna je samo radijalna jednačina (1.14) pa se problem efektivno svodi na jednodimenzioni.

Zbog održanja energije E i (1.14) može da se reši,

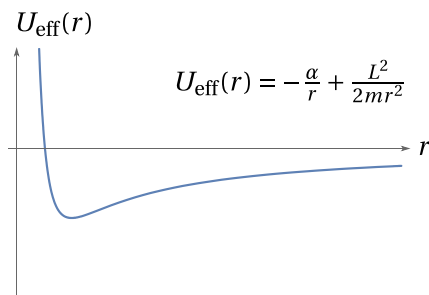
$$\frac{dr}{dt} = \sqrt{\frac{2}{m} \left(E - U(r) - \frac{L^2}{m^2 r^2} \right)}. \quad (1.19)$$

Treba zapaziti da je rešenje (1.19) identično rešenju za kretanje jednodimenzione čestice u efektivnom potencijalu $U_{\text{eff}}(r) = U(r) + L^2/(2mr^2)$. Član koji potiče od momenta impulsa zove se centrifugalna barijera; on za $L \neq 0$ "odbija" česticu od centra čak i kada je sila privlačna. Iz (1.18) i (1.19) možemo da odredimo trajektoriju čestice kao rešenje jednačine

$$\frac{d\theta}{dr} = \frac{\frac{L}{mr^2}}{\sqrt{\frac{2}{m} \left(E - U(r) - \frac{L^2}{m^2 r^2} \right)}}. \quad (1.20)$$



Slika 1.1: Coulomb-ov potencijal



Slika 1.2: Efektivni potencijal

1.2 Elektromagnetno polje i interferencija

Po kompleksnosti, sledeći fizički sistem koji klasična mehanika opisuje je polje. Fizičko polje je zadato vrednostima određene fizičke veličine u svim tačkama prostora (ili u delu prostora), u svim trenucima vremena, i zakonom transformacije (pri rotacijama: skalarno, vektorsko itd.). Karakteristični primeri su polje temperature, polje brzine tečnosti, gravitaciono polje, električno i magnetno polje. Pošto je polje zadato funkcijom koja zavisi od prostornih koordinata i vremena, jednačine koje opisuju njegovu dinamiku su parcijalne diferencijalne jednačine.

Jedno od osnovnih fizičkih polja je elektromagnetno: ono je zapravo jedino fundamentalno polje koje je od značaja u domenu rastojanja i energija relevantnih za kvantnu mehaniku¹. Elektromagnetno polje zadato je vrednostima električnog polja $\vec{E}(\vec{r}, t)$ i magnetnog polja $\vec{B}(\vec{r}, t)$, a njegove jednačine kretanja u vakuumu su Maxwell-ove jednačine²:

$$\operatorname{div} \vec{E} = 4\pi\rho \quad (1.21)$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad (1.22)$$

$$\operatorname{rot} \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \quad (1.23)$$

$$\operatorname{rot} \vec{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}, \quad (1.24)$$

gde je $\rho(\vec{r}, t)$ gustina naelektrisanja a $\vec{j}(\vec{r}, t)$ gustina električne struje. Jednačine (1.21) i (1.24) su izvorne jednačine jer opisuju kako promena elektromagnetnog polja zavisi od njegovih izvora, naelektrisanja i električne struje. Druge dve jednačine, (1.22) i (1.23), su bezizvorne jednačine i mogu se rešiti uvođenjem skalarnog i vektorskog potencijala, $\Phi(\vec{r}, t)$ i $\vec{A}(\vec{r}, t)$:

$$\vec{E} = -\operatorname{grad} \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \operatorname{rot} \vec{A}. \quad (1.25)$$

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

$$\Phi' = \Phi + \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \vec{A}' = \vec{A} - c \operatorname{grad} \chi, \quad (1.26)$$

¹Preciznije: jedino polje čije efekte kvantna mehanika na konceptualno zaokružen način može da opiše. Ipak, mnogi važni fenomeni vezani za nuklearne odnosno jake interakcije efektivno se, kvalitativno i kvantitativno, opisuju kvantnom mehanikom.

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

za proizvoljnu funkciju $\chi(\vec{r}, t)$. Ovakve transformacije potencijala nazivaju se *gradijentne* (ili *gejdž*) transformacije.

Odredićemo rešenja Maxwell-ovih jednačina u vakuumu, kada je $\rho = 0$ i $\vec{j} = 0$. Uzimajući rotor jednačine (1.23) i parcijalni izvod od (1.24) po vremenu, dobijamo da električno polje u vakuumu zadovoljava *talasnu jednačinu*

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \Delta \vec{E} = 0. \quad (1.27)$$

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

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0, \quad (1.28)$$

njeno opšte rešenje je

$$\phi(x, t) = f\left(t - \frac{x}{c}\right) + g\left(t + \frac{x}{c}\right), \quad (1.29)$$

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

I u slučaju kada ne možemo da odredimo opšte rešenje na jednostavan način, za linearne jednačine postoje sistematski metodi da se opšte rešenje nađe, kao i teoreme egzistencije rešenja³. Da bismo rešili talasnu jednačinu za električno polje (1.27) u opštem slučaju, naći ćemo prvo partikularna rešenja. Pošto jednačina ima konstantne koeficijente rešenja su eksponencijalne funkcije,

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (1.30)$$

a uslov (1.27) implicira da *frekvencija* ω i *talasni vektor* \vec{k} nisu nezavisni već važi

$$\omega^2 = c^2 \vec{k}^2. \quad (1.31)$$

Veza između talasnog broja i frekvence naziva se *disperziona relacija*, a rešenje (1.30) zove se *ravan monohromatski talas*. Talas je monohromatski jer ima određenu frekvencu ω a ravan jer je njegov talasni front ravan u trodimenzionom prostoru, $\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t = \text{const}$. Ova ravan je ortogonalna na pravac prostiranja talasa koji je zadat talasnim vektorom \vec{k} . Talasna dužina je $\lambda = 2\pi/k$, a \vec{E}_0 je amplituda talasa (1.30). Preostale Maxwell-ove jednačine dodatno određuju rešenje. Iz njih dobijamo

$$\vec{k} \cdot \vec{E}_0 = 0, \quad \vec{B} = -\frac{\vec{k}}{k} \times \vec{E} = \vec{B}_0. \quad (1.32)$$

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

Treba napomenuti da je zapis ravnog talasa (1.30), mada uobičajen, ipak formalan, jer eksponencijalna funkcija imaginarnog argumenta $e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$ ima kompleksne vrednosti, a znamo da su polja \vec{E} i \vec{B} realna: ovde se implicitno podrazumeva da je rešenje za polje realni (ili imaginarni) deo rešenja (1.30). U kvantnoj mehanici biće drugačije: talasne funkcije su nužno kompleksne funkcije realnih promenljivih pa zbog toga nisu direktno opservabilne odnosno merljive.

³Kod nelinearnih diferencijalnih jednačina postojanje rešenja za proizvoljne početne uslove nije garantovano i kod parcijalnih jednačina predstavlja netrivialnu matematičku osobinu.

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

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \int d^3k \vec{E}_0(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}, \quad (1.33)$$

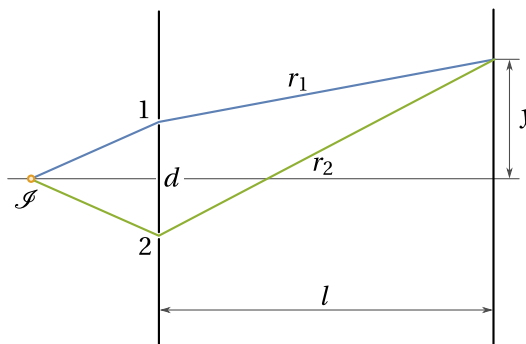
gde je $\omega = c|\vec{k}|$, a $\vec{E}_0(\vec{k})$ je *amplituda* ravnog talasa talasnog broja \vec{k} . Linearnost Maxwell-ovih jednačina tj. osobina da je zbir dva ili više rešenja opet rešenje (odnosno fizički moguća konfiguracija) je fenomenološki veoma važna i omogućava da se opišu pojave interferencije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

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

$$\mathcal{E} = \frac{1}{8\pi} (\vec{E}^2 + \vec{B}^2). \quad (1.34)$$

U slučaju ravnog talasa lako se dobija $\mathcal{E} = \vec{E}_0^2 / (4\pi)$, tj. gustina energije je proporcionalna kvadratu amplitude, kao kod harmonijskog oscilatora, a ne zavisi od frekvence, talasnog broja ili brzine talasa.

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



Slika 1.3: Interferencija na dva otvora.

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

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

$$\vec{E}_1 = \vec{E}_0 \sin(kr_1 - \omega t), \quad \vec{E}_2 = \vec{E}_0 \sin(kr_2 - \omega t), \quad (1.35)$$

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

gde sa slike vidimo da su rastojanja r_1 i r_2 jednaka

$$r_1^2 = l^2 + \left(y - \frac{d}{2}\right)^2, \quad r_2^2 = l^2 + \left(y + \frac{d}{2}\right)^2. \quad (1.36)$$

Prema tome, ukupno električno polje je

$$\vec{E} = 2\vec{E}_0 \cos \frac{k(r_2 - r_1)}{2} \sin \frac{kr_1 + kr_2 - 2\omega t}{2} \approx 2\vec{E}_0 \cos \frac{k(r_2 - r_1)}{2} \sin(kr - \omega t), \quad (1.37)$$

a razlika $\Delta = k(r_2 - r_1)$, sa tačnošću do prvog reda je

$$\Delta = k(r_2 - r_1) = kl \left(\sqrt{1 + \left(\frac{y}{l} + \frac{d}{2l}\right)^2} - \sqrt{1 + \left(\frac{y}{l} - \frac{d}{2l}\right)^2} \right) = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{yd}{l}, \quad (1.38)$$

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

$$\frac{\Delta}{2} = n\pi, \quad \text{tj.} \quad y = \frac{\lambda l}{d} n. \quad (1.39)$$

U slučaju destruktivne interferencija imamo tamne pruge koje su na rastojanjima

$$y = \frac{\lambda l}{d} \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (1.40)$$

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

Jasno je da bi se, ako bi izvor \mathcal{S} u eksperimentu sa istom geometrijom emitovao čestice, na ekranu dobila drugačija slika: dve svetle pruge na mestima preseka pravih koje spajaju izvor \mathcal{S} i otvore 1 i 2 sa ravni ekrana. Naravno, u sredini ekrana bilo bi zatamnjenje. To je zato što slobodne čestice putuju pravolinijski i njihova putanja je dobro lokalizovana, dok se talasi "proširu" u celom prostoru i u svim tačkama interferiraju. Pojava interferencije vidi se i u mnogim drugim fizičkim situacijama, kao na primer kada imamo više otvora: taj slučaj, difrakcija na rešetki, biće nam važan kasnije.

1.3 Boltzmann-ova raspodela

Jednačine klasične mehanike opisuju kretanje čestice i sistema više čestica. Ove jednačine su determinističke, što znači da je za potpun opis kretanja sistema u budućnosti potrebno da znamo početne uslove odnosno položaje i brzine čestica u početnom trenutku vremena, i da umemo da rešimo jednačine kretanja (tačno ili približno, na primer numerički). Međutim ako imamo više čestica u interakciji njihovo kretanje je spregnuto i po pravilu jednačine se ne mogu egzaktno rešiti. Sem toga ako je broj čestica veoma veliki (kao npr. u gasovima ili čvrstim telima koja se ispituju u laboratoriji, reda veličine 10^{20} ili 10^{23}), osim nemogućnosti da se jednačine reše nije moguće odrediti ni početne uslove za svaku od čestica. Zato se u opisu makroskopskih objekata koriste metode statističke fizike koje omogućavaju da se neki, najvažniji aspekti ponašanja makrosistema opišu i pored toga što ne znamo detalje kretanja pojedinih čestica – konstituenata sistema.

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

$$\rho_i = \rho(E_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_i}{N}. \quad (1.41)$$

Ovo je empirijska ili eksperimentalna definicija verovatnoće. *Funkcija raspodele* $\rho(E_i)$ može se definisati i apstraktno, kao funkcija pomoću koje izražavamo verovatnoće ishoda merenja, ili kako se u teoriji verovatnoće kaže, verovatnoće slučajnih događaja. U najopštijem slučaju, kod materijalnih sistema funkcija raspodele zavisi od položaja i impulsa svih čestica.

Verovatnoće u (1.41) definisane su pod pretpostavkom da je skup rezultata merenja, $\{E_i\}$, diskretan. Taj skup može biti i kontinualan i tada govorimo o verovatnoći dP da se izmeri vrednost E koja leži u intervalu $(E, E + dE)$. Ona se definiše preko gustine verovatnoće $\rho(E)$:

$$dP(E) = \rho(E)dE. \quad (1.42)$$

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

$$\sum_i \rho_i = 1, \quad \int \rho(E)dE = 1, \quad (1.43)$$

ali se ponekad i ne normira. Tada leva strana prethodnog izraza definiše tzv. partionu funkciju:

$$Z = \sum_k \rho_k, \quad Z = \int \rho(E)dE. \quad (1.44)$$

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

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_i E_i \rho_i}{\sum_i \rho_i}, \quad (1.45)$$

ali i proizvoljne funkcije, na primer

$$\langle E^n \rangle = \frac{\sum_i (E_i)^n \rho_i}{\sum_i \rho_i}. \quad (1.46)$$

Neodređenost odnosno odstupanje od srednje vrednosti pri merenju fizičke veličine kvantifikuje se *dispersijom* Δ . Kvadrat dispersije jednak je srednjem kvadratnom odstupanju od srednje vrednosti,

$$(\Delta(E))^2 = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2. \quad (1.47)$$

Kao što smo rekli, raspodela verovatnoće može da zavisi od različitih varijabli: u slučaju bacanja kocke na primer, slučajna promenljiva je broj (od 1 do 6) koji se pri bacanju dobije. Ali u fizici jedna od najvažnijih veličina je energija, posebno kada je sistem u ravnoteži. Pretpostavimo da je naš sistem čestica u stanju termodinamičke ravnoteže na temperaturi T . Pošto je ovo stanje stacionarno, njegova funkcija raspodele ρ može da zavisi samo od integrala kretanja: energije, impulsa i momenta impulsa: ali ako sistem miruje, impuls i moment impulsa su nula pa gustina verovatnoće zavisi samo od energije, $\rho = \rho(E)$. Odredićemo ovu zavisnost za sistem koji se sastoji od slabo interagujućih (ili neinteragujućih) čestica. Ako sistem podelimo na dva podsistema sa energijama E_1 i E_2 , ukupna energija je jednaka njihovom zbiru

$$E = E_1 + E_2. \quad (1.48)$$

Sa druge strane, pošto podsistemi ne interaguju, verovatnoća da prvi podsistem ima energiju E_1 a drugi E_2 je proizvod verovatnoća jer su ovi događaji nezavisni

$$\rho(E) = \rho(E_1 + E_2) = \rho(E_1)\rho(E_2) \quad (1.49)$$

(pretpostavljamo da je sistem homogen, tj. da su i podsistemi opisani istom raspodelom ρ). Jednakost (1.49) je jednačina za $\rho(E)$ i njeno rešenje je eksponencijalna funkcija,

$$\rho(E) = e^{-\beta E} \quad (1.50)$$

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

1.4 Zračenje crnog tela

Posle ovog kratkog uvoda prelazimo na opis eksperimenata sa kraja devetnaestog veka u kojima su se formirali osnovni pojmovi kvantne mehanike⁵. U pokušajima da se postojeći fizički koncepti usklade sa rezultatima eksperimenata izdvojile su se dve važne ideje: prva je ideja kvantovanja, odnosno ideja da njutnovska neprekidnost fizičkih pojava i procesa nije univerzalna i da postoje veličine čije vrednosti mogu biti diskretne. Druga ideja je da se pojmovi čestice (materijalne tačke) i polja (talasa) ne mogu uvek tačno razgraničiti, pa je na "veoma malim" rastojanjima stanje tačkaste čestice zapravo korektnije opisati "talasnom funkcijom", funkcijom koja čestici daje attribute fizičkog polja.

Počecemo od eksperimenata o osobinama zračenja crnog tela. Kao što je poznato, svako telo na temperaturi većoj od apsolutne nule zrači energiju putem elektromagnetnih talasa. Količina emitovane energije zavisi od površine tela i raste sa temperaturom. Stefan je 1879. empirijski odredio ovu zavisnost: ukupna izračena energija u jedinici vremena po jedinici površine je

$$\mathcal{U}(T) = \epsilon \sigma T^4, \quad (1.51)$$

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

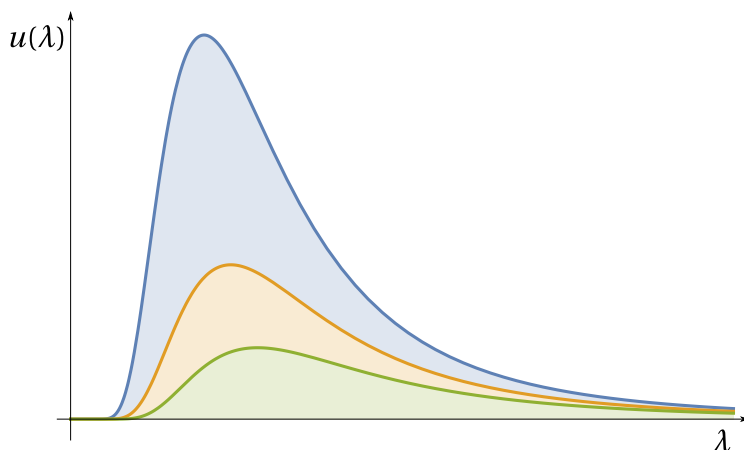
$$\mathcal{U}(T) = \int_0^{\infty} u(\omega) d\omega = \int_0^{\infty} u(\lambda) d\lambda. \quad (1.52)$$

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

Problem kako da se formula (1.51) i spektralna raspodela $u(\lambda)$ izvedu teorijski tj. iz mikroskopskog modela je za klasičnu fiziku nerešiv. 1900. godine Rayleigh je predložio klasični model u kome je dobio da je $u(\lambda) \sim \lambda^{-4}$; ovo izvođenje je upotpunio 1905. Jeans i ono je poznato kao Rayleigh-Jeans-ov model. Pošto je model jasan i prilično jednostavan objasnićemo ga u nekoliko koraka. Crno telo realizovano je kao kockasta metalna kutija u kojoj se nalazi elektromagnetno zračenje u toplotnoj ravnoteži na temperaturi T . Pretpostavimo da je dužina ivice kocke a i da njene stranice leže u ravnima $x = 0, a, y = 0, a, z = 0, a$. Pošto su stranice od metala, elektromagnetni talasi unutar kutije su stojeći talasi: to sledi iz uslova da komponente električnog polja tangentne na stranice moraju biti nula. Ovaj uslov, primenjen na stranice $x = 0, y = 0$ i $z = 0$ dozvoljava samo talase oblika

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t} \sin k_x x \sin k_y y \sin k_z z, \quad (1.53)$$

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



Slika 1.4: Spektralna raspodela za crno telo.

a kada se primeni na preostale tri stranice $x = a$, $y = a$ i $z = a$ daje uslove $\sin k_x a = 0$, $\sin k_y a = 0$ i $\sin k_z a = 0$. To znači da su dozvoljene samo vrednosti talasnog broja koje odgovaraju stojećim talasima,

$$k_x = \frac{\pi n_x}{a}, \quad k_y = \frac{\pi n_y}{a}, \quad k_z = \frac{\pi n_z}{a}, \quad (1.54)$$

gde su n_x , n_y i n_z su celi brojevi. Frekvencija talasa je

$$\omega^2 = \frac{c^2 \pi^2}{a^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \quad (1.55)$$

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

Iz elektrodinamike je poznato da je elektromagnetno polje u vakuumu ekvivalentno sistemu neinteragujućih oscilatora različitih frekvenci. Zato je u stanju termodinamičke ravnoteže funkcija raspodele po energiji Boltzmann-ova raspodela. Srednja vrednost energije za talase fiksirane frekvencije ω je

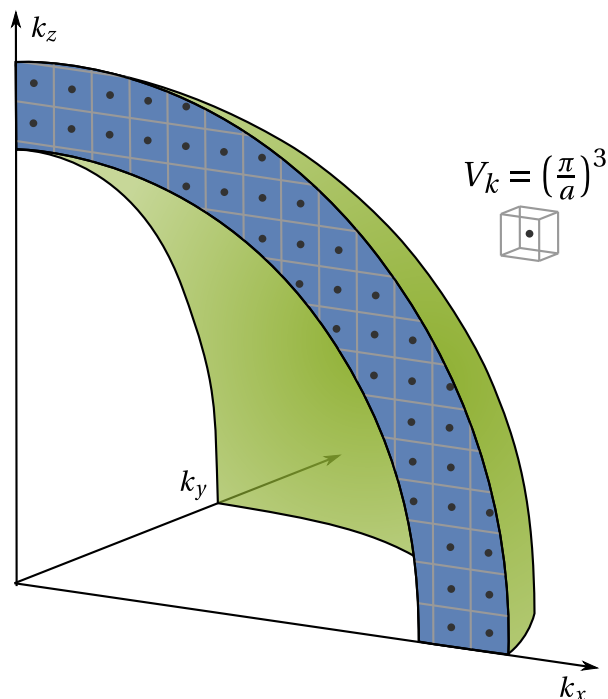
$$\langle E_\omega \rangle = \frac{\int_0^\infty E e^{-\beta E} dE}{\int_0^\infty e^{-\beta E} dE} = -\frac{d}{d\beta} \log \int_0^\infty e^{-\beta E} dE = \frac{1}{\beta} = kT, \quad (1.56)$$

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

$$du = u(\omega) d\omega = \frac{\langle E_\omega \rangle}{V} N(\omega) d\omega, \quad (1.57)$$

gde je $N(\omega) d\omega$ broj talasa frekvencije ω a $V = a^3$ zapremina crnog tela. Pošto je zbog graničnog uslova (1.54) broj talasa proporcionalan broju celobrojnih tačaka u k -prostoru, u opsegu frekvenci između ω i $\omega + d\omega$ ima onoliko talasa koliko ih ima u sfernom sloju poluprečnika ω i debljine $d\omega$ tj. tačnije u njegovoj osmini jer je ω pozitivan broj pa nam treba samo deo sfere u prvom oktantu. Dakle imamo

$$N(\omega) d\omega = \frac{1}{8} 4\pi \omega^2 d\omega \left(\frac{a}{\pi c} \right)^3 2 = \left(\frac{a}{\pi c} \right)^3 \pi \omega^2 d\omega. \quad (1.58)$$



Slika 1.5: Rayleigh-Jeans-ov model – prebrojavanje stanja.

U poslednjoj formuli smo geometrijski rezultat pomnožili sa 2 jer elektromagnetni talas date frekvence i talasnog broja ima dve polarizacije tj. dva stepena slobode. Prema tome, za spektralnu raspodelu dobijamo

$$du = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} kT. \quad (1.59)$$

Ako sa promenljive ω pređemo na talasnu dužinu $\lambda = 2\pi c/\omega$, imamo

$$du = u(\lambda)d\lambda = 8\pi kT \frac{d\lambda}{\lambda^4}. \quad (1.60)$$

Ova spektralna raspodela ne samo da se ne slaže sa eksperimentalnom krivom sa slike 1.4, nego za ukupnu izračenu energiju daje beskonačnu vrednost (koja uz to linearno zavisi od temperature):

$$\mathcal{U}(T) = \int_0^\infty u(\omega)d\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega^2 d\omega = \infty \cdot kT. \quad (1.61)$$

Taj rezultat je u svoje vreme nazvan ultravioletna katastrofa jer integral energije (1.61) divergira u gornjoj granici $\omega \rightarrow \infty$, odnosno u ultraljubičastom delu spektra.

Modernim jezikom kvantne teorije polja rekli bismo da integral (1.61) treba da se "regularizuje"⁶. Neka vrsta regularizacije je bila u osnovi Planck-ove ideje: da se srednja vrednost $\langle E_\omega \rangle$ modifikuje tako da ukupna energija bude konačna. Planck-ova hipoteza iz 1901. dobila je naziv *postulat o kvantovanju* i glasi:

ZA FIZIČKI ENTITET KOJI VRŠI HARMONIJSKO OSCILOVANJE FREKVENCOM ω JEDINE DOZVOLJENE VREDNOSTI ENERGIJE SU $n\hbar\omega$, GDE JE n PRIRODAN BROJ A $\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34}$ Js KONSTANTA.

Kada se uvede ovakva pretpostavka jasno je da se usrednjavanje energije u formuli (1.56), umesto po kontinualnim vrednostima od 0 do ∞ , vrši po nizu jednako udaljenih, diskretnih tačaka. Pošto je vrednost konstante \hbar mala, i rastojanje između dve susedne tačke $\hbar\omega$ je vrlo

⁶Regularizacija je metod kojim se beskonačni (divergentni) izraz, najčešće integral ili suma, izražava kao limes konačnog izraza, pri čemu se njegova divergencija kvantifikuje nekim od parametara koji figurišu u konačnom izrazu.

malo (sem naravno kad $\omega \rightarrow \infty$), tako da je ovakva zamena u nekom smislu opravdana. Za srednju vrednost energije oscilatora frekvence ω se pod ovom pretpostavkom dobija

$$\langle E_\omega \rangle = \frac{\sum_0^\infty n\hbar\omega e^{-\beta n\hbar\omega}}{\sum_0^\infty e^{-\beta n\hbar\omega}} = -\frac{d}{d\beta} \log \sum_0^\infty e^{-\beta n\hbar\omega} = \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}, \quad (1.62)$$

pri čemu se u izračunavanju koristi da je suma geometrijskog reda

$$1 + a + a^2 + \dots = \frac{1}{1 - a}, \quad (1.63)$$

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

$$e^{\beta\hbar\omega} = 1 + \beta\hbar\omega, \quad (1.64)$$

pa je $\langle E_\omega \rangle = 1/\beta = kT$ i dobijamo klasični rezultat (1.56). Koristeći izraz (1.58) za broj oscilatora $N(\omega)$, za spektralnu raspodelu dobija se tzv. Planck-ova raspodela

$$u(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}. \quad (1.65)$$

Prema tome, za ukupnu izračenu energiju dobijamo

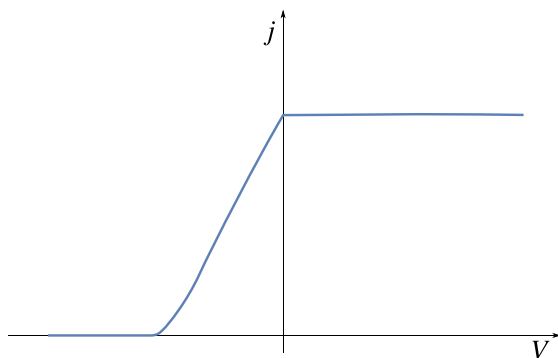
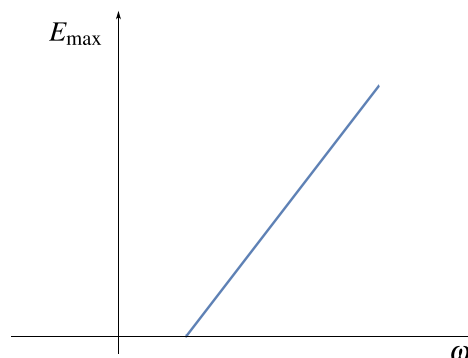
$$\mathcal{U}(T) = \int u(\omega) d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{k^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \frac{\pi^4}{15} T^4. \quad (1.66)$$

Vrednost određenog integrala po x u pretposlednjoj jednakosti je $\pi^4/15$. Kada se u formulu (1.66) zamene numeričke vrednosti konstanti k , \hbar , c i π , za koeficijent proporcionalnosti između \mathcal{U} i T^4 dobija se upravo eksperimentalna vrednost Stefan-Boltzmann-ove konstante σ . To pokazuje da, ma kako Planck-ova hipoteza izgledala ili bila *ad hoc*, ona sadrži mehanizam koji objašnjava zračenje crnog tela.

1.5 Fotoefekat

Fotoefekat je eksperimentalno otkrio Hertz 1887. U drugoj polovini devetnaestog veka vršen je veliki broj eksperimenata u kojima je ispitivan prolazak električne struje kroz katodnu cev (staklenu cev sa dve elektrode ispunjenu razređenim gasom). Posebno važno otkriće bilo je da se u cevi pri veoma niskim pritiscima odnosno u vakuumu detektuju "katodni zraci", karakteristični po tome što stvaraju senku na suprotnom zidu cevi, i skreću u električnom polju. Perrin je 1895. pretpostavio da su katodni zraci u stvari naelektrisane čestice, što je 1897. dokazao J. J. Thomson precizno izmerivši odnos naelektrisanja i mase, e/m . Thomson je dobio rezultat 1836 puta veći od količnika e/m_H za jonizovani vodonikov atom: ovo otkriće bilo je zapravo otkriće elektrona.

U Hertz-ovom eksperimentu, katoda u katodnoj cevi osvetljavana je ultraljubičastim zracima i merena je struja kroz cev. Pošto efekat postoji i kada je u cevi vakuum, pretpostavljeno je da su nosioci struje elektroni izbijeni iz katode, što je Lenard 1900. godine potvrdio merenjem e/m . Zavisnost struje koja se meri od napona između elektroda data je na slici 1.6: struja praktično ne zavisi od napona osim za njegove negativne vrednosti, a anulira se pri vrednosti $V = -V_{\max}$. To znači da elektroni u trenutku kada su izbijeni iz katode imaju nenultu kinetičku energiju čija maksimalna vrednost iznosi $E_{\max} = eV_{\max}$. Osim toga, mada je za $V > 0$ struja proporcionalna intenzitetu upadnog zračenja, E_{\max} ne zavisi od intenziteta zračenja.

Slika 1.6: Fotoefekat, $j(V)$ Slika 1.7: Zavisnost $E_{\max}(\omega)$

I u ovom slučaju relativno lako se vidi da klasična teorija elektromagnetnog zračenja ne može da objasni eksperimentalnih rezultata. Klasično, energija koju nosi elektromagnetni talas je proporcionalna kvadratu njegove amplitude odnosno intenzitetu svetlosti: prema tome, i karakteristična energija E_{\max} trebalo bi da zavisi od intenziteta zračenja, što se u eksperimentu ne dobija. Detaljniji račun pokazuje da bi u klasičnom opisu trebalo da postoji i drugi efekat: pošto energija elektromagnetnog talasa nije lokalizovana, njen prenos na elektrone nije trenutni, pa bi i električna struja trebalo da se detektuje sa zakašnjenjem. Za uslove u opisanom eksperimentu vreme kašnjenja bilo bi reda veličine minuta, što u eksperimentu nije opservirano.

Objašnjenje fotoefekta dao je 1905. Einstein razvijajući Planck-ovu hipotezu o energiji elektromagnetnih talasa i uvodeći sledeću pretpostavku:

SVETLOST SE PRENOSI U DELIĆIMA, SVETLOSNI Kvantima koji su lokalizovani: kvant svetlosti, foton frekvence ω , nosi energiju $\hbar\omega$ i kreće se brzinom c .

Mehanizam fotoefekta je onda sledeći: interakcija elektromagnetnog zračenja sa katodom je zapravo sudar fotona i elektrona. U ovom sudaru energija fotona se gotovo trenutno apsorbira i prenosi na elektron; iz zakona održanja energije sledi

$$\hbar\omega = A + \frac{1}{2}mv_{\max}^2, \quad \frac{1}{2}mv_{\max}^2 = eV_{\max} = E_{\max}, \quad (1.67)$$

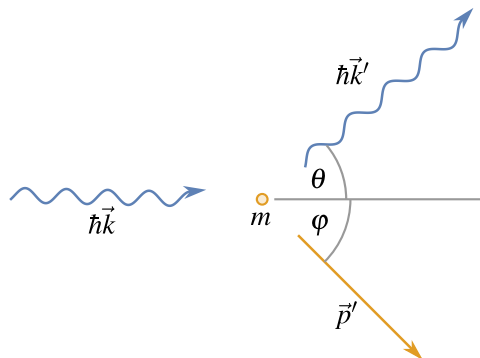
gde je A izlazni rad elektrona odnosno potencijalna energija kojom je elektron vezan za kristalnu rešetku katode. Jednačina (1.67) je Einstein-ova jednačina fotoefekta. Einstein-ova teorija između ostalog predviđa linearnu zavisnost između E_{\max} i frekvence upadnog zračenja ω :

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

Ovu zavisnost je 1916. eksperimentalno proverio i potvrdio Millikan, i to je bio jedan od velikih trijumfa kvantne teorije. Takođe, određivanjem koeficijenta pravca prave na grafiku 1.7, Millikan je izmerio Planck-ovu konstantu \hbar koja se do na eksperimentalnu grešku poklopila sa odranije poznatom vrednošću.

Ime fotoni kvantima svetlosti dao je 1926. Lewis. Interesantno je da je prva teorija svetlosti (Descartes 1637, Newton 1704) koja je objašnjavala fenomene geometrijske optike takođe bila čestična. Ova teorija je dominirala do otkrića pojave interferencije i Young-ovog eksperimenta 1801, a tokom devetnaestog veka bila je potpuno napuštena. Ni sam Planck nije verovao u čestičnu prirodu svetlosti i u Einstein-ovu smelu fizičku interpretaciju, pa je formulu $E = \hbar\omega$ smatrao za tehnički korak čiji fizički smisao tek treba da se razume⁷.

⁷Još jedan izuzetan pregled moderne fizike sa detaljnim uvidom u razvoj matematičkih ideja dat je u knjizi G. G. Emch-a, *Mathematical and Conceptual Foundations of 20th-Century Physics*, North-Holland, 1984.



Slika 1.8: Compton-ovo rasejanje.

1.6 Compton-ov efekat

Einstein-ovo objašnjenje fotoefekta po kome se energija elektromagnetnog talasa predaje elektronu u procesu sudara mnogi fizičari nisu mogli da prihvate, jer ovo objašnjenje je zapravo odustajanje od klasične teorije zračenja: kvanti svetlosti opisani su kao čestice. Korpuskularno ponašanje svetlosti potvrđeno je i u Compton-ovom efektu: da bi se objasnio dobijeni eksperimentalni rezultat, fotonu treba da se pridruži ne samo energija $E = \hbar\omega$ nego i impuls \vec{p} čija je vrednost, u skladu sa specijalnom teorijom relativnosti, $p = E/c = \hbar k$.

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

$$\lambda' - \lambda = \lambda_C(1 - \cos\theta). \quad (1.68)$$

Ova veza ne zavisi od vrste metala na kome se X-zraci rasejavaju, što ukazuje da elektromagnetno zračenje ne interaguje sa atomima metala nego sa elektronima. Pored toga, konstanta λ_C , Compton-ova talasna dužina, ne zavisi od talasne dužine X-zračenja.

Compton je pretpostavio da je proces koji se dešava u metalu zapravo sudar fotona sa elektronom koji približno miruje. Ova pretpostavka je opravdana jer su tipične energije vezivanja elektrona u metalu reda veličine energija ultraljubičastog zračenja, odnosno za nekoliko redova veličine manje od energija X-zračenja. Označimo energiju upadnog fotona sa $\hbar\omega$: pošto se fotoni kreću brzinom svetlosti njihova masa mirovanja je nula a impuls je jednak $\hbar\vec{k}$, gde je \vec{k} talasni broj. Sudar fotona sa elektronom je elastičan pa se u njemu se održavaju energija i impuls. Pošto je energija X-zraka uporediva po redu veličine sa energijom mirovanja elektrona, neophodno je da koristimo relativističke zakone održanja energije i impulsa. Elektron ima masu m i pre sudara sa fotonom miruje, kao na slici 1.8. Označimo energiju i impuls fotona posle sudara sa $\hbar\omega'$ i $\hbar\vec{k}'$, impuls elektrona posle sudara sa \vec{p}' , a uglove rasejanja fotona i elektrona sa θ i φ . Zakoni održanja glase

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

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

$$\frac{1}{\omega'} = \frac{1}{\omega} + \frac{\hbar}{mc^2}(1 - \cos\theta), \quad (1.69)$$

što daje formulu (1.68) kad se sa frekvenci pređe na talasne dužine. Pri tome je $\lambda_C = h/(mc) = 0.243 \cdot 10^{-11} \text{m}$, u skladu sa eksperimentalno dobijenom vrednošću.

U kasnijim eksperimentima (Bothe i Wilson 1923, Bothe i Geiger 1925, Bless 1927) opservirani su i sami elektroni posle sudara sa fotonom i merena je njihova energija; takođe je potvrđeno da se elektron pojavljuje istovremeno sa rasejanim fotonom tj. da je sudar trenutni.

Fotoefekat i Compton-ov efekat ukazuju na to da je priroda elektromagnetnog zračenja *dualna*: u ovim eksperimentima detektuju se kvanti svetlosti koji su prostorno lokalizovani tj. ponašaju se kao čestice određene energije i impulsa. Sa druge strane, u brojnim ranijim merenjima koji datiraju još od Young-ovog interferencionog eksperimenta dobro su i detaljno proverene talasne osobine svetlosti. Kao što ćemo videti, slična dualnost u ponašanju uskoro je otkrivena i kod materijalnih čestica: ustanovljeno je da se u nekim domenima vrednosti dužine i energije, materijalne čestice ponašaju kao talasi.

1.7 Linijski spektri i model atoma

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

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

$$\lambda = 3646 \frac{n^2}{n^2 - 4}. \quad (1.70)$$

U prethodnoj formuli talasne dužine su izražene u angstromima ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$) a n je prirodan broj veći od 2. Istražujući dalje, Rydberg je 1890. ovu formulu napisao u pogodnijem obliku

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (1.71)$$

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

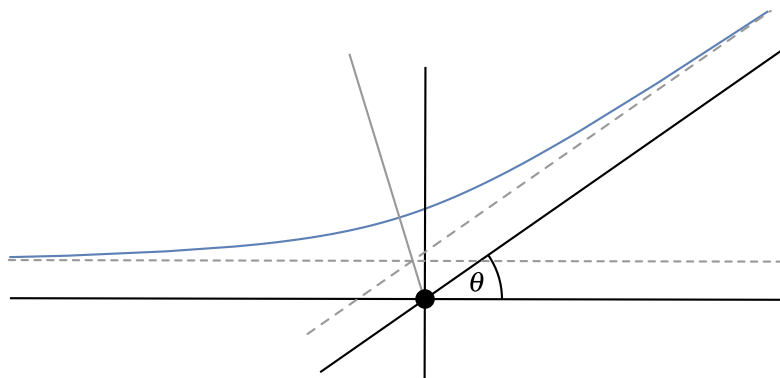
$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (1.72)$$

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

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{(m-a)^2} - \frac{1}{(n-b)^2} \right), \quad (1.73)$$

gde su a i b konstante.

Formula (1.72) izgleda toliko jednostavno da se nameće ideja da ona u sebi sadrži neki fundamentalni fizički zakon. Prvi korak ka njenom objašnjenju bilo je razumevanje strukture atoma vodonika. Od Thomson-ovog otkrića elektrona postalo je jasno da se atomi (pošto su električno neutralni) sastoje od elektrona i od pozitivno naelektrisanog "ostatka". Ovo je potvrđeno u eksperimentima rasejanja X-zraka na atomima (Barkla, 1909) u kojima je utvrđeno



Slika 1.9: Rutherford-ovo rasejanje.

da je broj elektrona u atomu, Z , približno jednak polovini atomske mase merene u atomskim jedinicama mase. Prva, Thomson-ova, pretpostavka bila je da je pozitivno naelektrisanje uniformno raspoređeno u atomu i taj model je ispitivan u eksperimentima rasejanja α -čestica na tankim metalnim listovima (Rutherford, 1909). Analizirajući rezultate eksperimenta Rutherford je zaključio da se oni ne slažu sa Thomson-ovim modelom, jer model predviđa da je broj čestica rasejanih pod velikim uglovima (većim od $\pi/2$) toliko mali da one praktično ne bi trebalo da budu detektovane, što u eksperimentu nije bio slučaj. Rutherford je pretpostavio da je svo pozitivno naelektrisanje (a time i masa) skoncentrisano u centru, "jezgru" atoma i izračunao presek rasejanja α -čestica u Coulomb-ovom elektrostatičkom polju jezgra. Dobio je izraz

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha^2}{4m^2v^4} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}, \quad (1.74)$$

tzv. *Rutherford-ovu formulu*: ovom izrazu θ je ugao rasejanja a v brzina upadnog snopa α -čestica. Neposredno posle njenog izvođenja, u eksperimentima Geiger-a i Marsden-a 1911. mereno je i potvrđeno da je efikasni presek za rasejanje α -čestica na atomima opisan baš ovim zakonom. To znači da je atom skoro prazan, odnosno da je jezgro veoma malih dimenzija: Rutherford je dimenzije jezgra (ispravno) procenio na 10^{-14} m. Interesantno je da i kvantno-mehanički račun, kao što ćemo videti u poslednjoj glavi, daje u vodećem redu potpuno istu zavisnost efikasnog preseka od ugla rasejanja. To je u neku ruku bila srećna okolnost za fiziku jer je jednačina (1.74) navela Rutherford-a da predloži planetarni model atoma koji je kasnije modifikovao Bohr, a Bohr-ov model bio je od ključnog značaja za nastanak kvantne mehanike.

Rutherford-ov planetarni model atoma je jednostavan: u centru atoma nalazi se masivno pozitivno naelektrisano jezgro oko koga kruže elektroni kao planete oko Sunca. Odmah se može ukazati na nedostatak ovog modela: elektroni, za razliku od planeta⁸, pri kružnom kretanju oko jezgra zrače elektromagnetne talase i u tom procesu gube energiju. Energija elektrona se brzo izrači i elektron pada na jezgro, odnosno, Rutherford-ov atom nije stabilan.

Bohr je 1913. predložio model koji ovaj, osnovni problem Rutherford-ovog modela, rešava na postulativan način. Model se bazira na dve pretpostavke:

1. ELEKTRONI U ATOMU KREĆU SE OKO JEZGRA PO KRUŽNIM PUTANJAMA, ALI DOZVOLJENE TJ. STABILNE SU SAMO ORBITE NA KOJIMA JE MOMENT IMPULSA KVANTOVAN I IMA VREDNOSTI $L = n\hbar$, GDE JE n PRIRODAN BROJ.
2. NA OVIM STACIONARNIM PUTANJAMA ELEKTRON NE ZRAČI; ZRAČI SAMO PRI PRELAZU SA JEDNE NA DRUGU ORBITU I TO FREKVENCOM $\hbar\omega = E_i - E_f$, GDE SU E_i I E_f ENERGIJE ELEKTRONA NA INICIJALNOJ I FINALNOJ ORBITI.

⁸Ovo zapravo nije tačno. 2015. gravitacioni talasi su direktno detektovani, pa znamo da planete pri kruženju oko Sunca, kao i dve crne rupe pri kruženju oko zajedničkog centra mase, emituju energiju: međutim, u slučaju planeta ova energija je toliko mala da ne može da se izmeri.

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

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}, \quad \text{tj.} \quad r = \frac{e^2}{mv^2}. \quad (1.75)$$

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

$$L_n = n\hbar\omega = mr_n v_n \quad (1.76)$$

odgovaraju brzina i poluprečnik

$$v_n = \frac{e^2}{n\hbar} \quad \text{i} \quad r_n = \frac{\hbar^2}{me^2} n^2 = a_B n^2, \quad (1.77)$$

i energija

$$E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 - \frac{e^2}{r_n} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}. \quad (1.78)$$

Konstanta $a_B = \hbar^2/(me^2) = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ je *Bohr-ov radijus* i definiše dimenzije atoma odnosno skalu atomske fizike. Kada se u formuli (1.78) zamene vrednosti za masu i naelektrisanje elektrona i izračuna razlika $E_n - E_m$, dobija se formula (1.72) za talasne dužine u spektru vodonika, kao i slaganje sa eksperimentalno izmerenom vrednošću Rydberg-ove konstante R_H .

Bohr-ovi postulati ukazuju da su u prirodi, osim energije, kvantovane i druge fizičke veličine. Pitanje koje se prirodno nameće je: da li postoji neki opšti, teorijski princip koji ovakve fizičke veličine karakteriše? I posebno: da li postoji veza između Planck-ovog i Bohr-ovih postulata kvantovanja? Odgovarajući princip, *Sommerfeld-ovo pravilo*, formulisao je Sommerfeld 1915, i on glasi:

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

$$\oint p_i dx_i = 2\pi\hbar n_i, \quad (1.79)$$

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

Lako se vidi da Sommerfeld-ovo pravilo kvantovanja može da se primeni na vodonikov atom. U slučaju kretanja u centralnom potencijalu održava se moment impulsa, $p_\theta = L$, pa ako primenimo (1.79) na promenljive θ i p_θ direktno dobijamo

$$\oint p_\theta d\theta = 2\pi L = 2\pi\hbar n, \quad (1.80)$$

tj. $L = n\hbar$. Kad se pravilo primeni na drugi par promenljivih, r i p_r , dobija se kvantovanje energije (1.78), i to ne samo za kružne nego i za eliptične orbite (u tom slučaju r_n je velika poluosu elipse). Interesantno je da Sommerfeld-ovo pravilo može da se primeni i na relativističku generalizaciju Bohr-ovog modela pri čemu daje eksperimentalno izmerenu finu strukturu spektra atoma (Bohr 1915, Sommerfeld 1916) koju je eksperimentalno otkrio Michelson 1891. godine.

Sa druge strane, pravilo daje i kvantovanje energije harmonijskog oscilatora. Hamiltonijan jednodimenzionog oscilatora dat je sa (1.11), a rešenje odgovarajućih klasičnih jednačina kretanja, (1.12)

$$x = a \cos(\omega t + \varphi), \quad p = -m\omega a \sin(\omega t + \varphi). \quad (1.81)$$

Ako uvrstimo ovo rešenje u (1.79) i integramo po jednom periodu, $T = 2\pi/\omega$, dobijamo

$$\oint p dx = \int_0^T m\omega^2 a^2 \sin^2(\omega t + \varphi) dt = \pi m\omega a^2, \quad (1.82)$$

pa Sommerfeld-ovo pravilo daje

$$m\omega a^2 = 2\hbar n. \quad (1.83)$$

Za energiju oscilatora se, prema tome, dobija

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 a^2 = n\hbar\omega, \quad (1.84)$$

odnosno Planck-ova formula.

Sommerfeld-ovo pravilo imalo je i konceptualni i teorijski značaj zato što je povezalokvantovanje odnosno diskretnost fizičkih veličina sa finitnim kretanjima sistema, i sem toga ukazalo je na značaj kanonskih promenljivih. Međutim intuitivno, za dalji razvoj ideja kvantne mehanike možda je bio važniji drugi aspekt Bohr-ovog modela: ideja o talasnoj prirodi elektrona. Naime, ako bismo elektronu na n -toj orbiti pripisali talasnu dužinu

$$\lambda_n = \frac{h}{p_n} = \frac{2\pi\hbar}{mv_n}, \quad (1.85)$$

vidimo da važi

$$n\lambda_n = 2\pi r_n, \quad (1.86)$$

odnosno, na obimu kruga koji predstavlja trajektoriju elektrona nalazi se tačno n talasnih dužina hipotetičkog, elektronu pripisanog talasa. Drugim rečima, kvantovanje momenta impulsa možemo interpretirati kao uslov da su stabilne samo one orbite na kojima je elektron, "stojeći talas". Važna osobina stojećih talasa je da ne prenose energiju, što može da se poveže sa činjenicom da na stacionarnim orbitama elektron ne zrači. Iako ova interpretacija deluje pomalo proizvoljno, može se reći da Bohr-ov model sugerise da su čestice u nekom smislu – talasi.

1.8 Talasno-čestični dualizam

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

ČESTICI KOJA IMA IMPULS \vec{p} I ENERGIJU E MOŽE DA SE PRIDRUŽI TALAS FREKVENCE $\omega = E/\hbar$ I TALASNOG BROJA $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$: KRETANJE ČESTICE SE PRI TOME OPISUJE KAO PROPAGACIJA TALASA.

U slučaju elektromagnetnih talasa zaista važi $\omega = kc$ odnosno $E = pc$. Sa druge strane, za slobodnu nerelativističku česticu je $E = p^2/(2m)$, tako da je disperziona relacija za slobodan "elektronski talas"

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (1.87)$$

De Broglie-ev postulat kaže i da se kretanje čestice može opisati kao propagacija talasa, odnosno da je jednačina kretanja neka vrsta talasne jednačine: to je upravo Schrödinger-ova jednačina.

Talasni aspekti ponašanja čestica manifestuju se na rastojanjima koja su reda veličine de Broglie-eve talasne dužine, kao što se efekti interferencije i difrakcije svetlosti vide samo kada su rastojanja između otvora uporediva sa njenom talasnom dužinom. Ako izračunamo de Broglie-evu talasnu dužinu npr. za elektron kinetičke energije $E = 10\text{eV}$, dobijamo $\lambda = 3.9 \cdot 10^{-10}\text{m}$. Ova talasna dužina nije toliko mala da se ne bi mogla izmeriti: reda je veličine međuatomskih rastojanja u kristalima. Zato su talasne osobine elektrona prvi put eksperimentalno potvrđene upravo difrakcijom elektrona na kristalima, i to na kristalu nikla u eksperimentu Davisson-a i Germer-a 1927. i na kristalu zlata u eksperimentu G. P. Thomson-a 1928. Uskoro

posle toga Estermann, Frisch i Stern dokazali su postojanje difrakcije i u rasejanju atoma helijuma. Do danas su izvedeni brojni difrakcioni i interferencioni eksperimenti, ne samo sa elektronima i neutronima nego i sa velikim, "makroskopskim" organskim molekulima i to u (tehnički zahtevnijoj) varijanti interferencije na dva otvora, čime je talasna priroda čestica i direktno potvrđena.

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

1.9 Schrödinger-ova jednačina

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

$$\Psi(t, \vec{r}) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (1.88)$$

gde su talasni vektor i frekvencija $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$, $\omega = E/\hbar$, onda je najjednostavnija talasna jednačina koja daje tu disperzionu relaciju

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi, \quad (1.89)$$

jer kao što smo videli, pri delovanju na ravan talas izvod $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ se svodi na množenje sa E , a gradijent $-i\hbar \nabla$ na množenje sa \vec{p} . I u nekom, matematički preciznijem smislu, Schrödinger-ova jednačina se dobija zamenom vektora impulsa čestice \vec{p} operatorom $\hat{p} = -i\hbar \nabla$, i ta zamenažapravo je *kvantovanje*. U slučaju mehanike tj. sistema sa konačnim brojem stepeni slobode postupak kvantovanja, odnosno reprezentovanja koordinate i impulsa operatorima, je u osnovi jednoznačan. Ukoliko čestica nije slobodna nego se kreće u potencijalu $U(\vec{r}, t)$, Schrödinger-ova jednačina opet je ekvivalentna izrazu za energiju čestice, $E = p^2/(2m) + U(\vec{r}, t)$, i glasi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U\Psi. \quad (1.90)$$

Interesantno je napomenuti da su i Schrödinger, kao i Born i Jordan, pokušali da jednačinu kretanja kvantne (talasne, odnosno matrične) mehanike formulišu kao varijacioni princip analogan principu najmanjeg dejstva. Danas, međutim znamo da to nije moguće: iako se Schrödinger-ova jednačina može dobiti iz varijacionog problema, funkcional koji se varira nije dejstvo sistema pa je takvo rešenje, u kontekstu fizike, čisto formalno. Dejstvo u kvantnoj fizici ima vrlo specifičnu ulogu koja se najbolje vidi u funkcionalnom formalizmu kvantne mehanike i kvantne teorije polja.

1.10 Zadaci

1.1 Polazeći od definicije Poisson-ove zagrade (1.8) pokazati da važe sledeće osobine

- a) $\{A, B\}_{PZ} = -\{B, A\}_{PZ}$,
- b) $\{A + B, C\}_{PZ} = \{A, C\}_{PZ} + \{B, C\}_{PZ}$,
- c) $\{\alpha A, B\}_{PZ} = \alpha \{A, B\}_{PZ}$,
- d) $\{AB, C\}_{PZ} = A\{B, C\}_{PZ} + \{A, C\}_{PZ}B$,
- e) $\{\{A, B\}_{PZ}, C\}_{PZ} + \{\{B, C\}_{PZ}, A\}_{PZ} + \{\{C, A\}_{PZ}, B\}_{PZ} = 0$.

Ovde su $A = A(q_i, p_i, t)$, $B = B(q_i, p_i, t)$ i $C = C(q_i, p_i, t)$ funkcije faznih promenljivih, dok je α konstanta.

1.2 Kretanje slobodne čestice je opisano s tri Dekartove koordinate x , y i z .

- a) Naći konjugovane impulse p_x , p_y i p_z .
- b) Vektor momenta impulsa je

$$\vec{L} = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}.$$

Naći Poisson-ovu zagradu $\{L_x, L_y\}_{PZ}$.

1.3 Čestica mase m i naelektrisanja e nalaze se u elektromagnetnom polju koje je opisano skalarnim potencijalom Φ i vektorskim potencijalom \vec{A} . Električno \vec{E} i magnetno polje \vec{B} dati su izrazom (1.25). Kretanje čestice se opisuje nezavisnim generalisanim koordinatama (x, y, z) a lagranžijan je

$$L = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 - e\Phi + \frac{e}{c} \vec{A} \cdot \vec{v}.$$

- a) Pokazati da ovaj lagranžijan opisuje kretanje čestice u elektromagnetnom polju tj. naći jednačine kretanja.
- b) Razmotriti kako gradijentne transformacije (1.26) menjaju lagranžijan.
- c) Odrediti generalisane impulse koji slede iz ovog lagranžijana.

1.4 Polazeći od Maxwell-ovih jednačina sa izvorima (1.21) i (1.24) i jednačine kojima se uvode elektromagnetni potencijali (1.25) naći jednačine koje zadovoljavaju skalarni i vektorski potencijal $\Phi(\vec{r}, t)$ i $\vec{A}(\vec{r}, t)$.

1.5 Pokazati da je jednačina kontinuiteta naelektrisanja

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0$$

posledica Maxwell-ovih jednačina.

1.6 Razmotriti skalarnu talasnu jednačinu u tri dimenzije.

- a) Pokazati da za radijalni deo laplasijana važi

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r.$$

- b) Pokazati da su sferni talasi $Ae^{i\omega t \pm ikr}/r$ rešenja trodimenzionalne talasne jednačine ako je $\omega = kc$ (ovde su ω ugaona frekvencija, k intenzitet talasnog vektora, dok je c brzina svetlosti).

1.7 Dva identična zvučnika udaljena jedan od drugog $d = 2$ metra emituju tonove talasne dužine 0,4 m. Duž linije normalne na pravac koji spaja zvučnike kreće se mikrofona. Neka je x rastojanje između zvučnika i mikrofona. Odrediti rastojanja na kojima dolazi do konstruktivne i destruktivne interferencije.



1.8 Veličina $A(x)$ je definisana na intervalu (a, b) i ima statistički karakter. Neka je (ΔA) disperzija i $\langle A^n \rangle$ srednja vrednost n -tog stepena veličine A . Pokazati da je:

a) $(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$;

b) $(\Delta A)^2 \geq 0$;

1.9 Izolovan sistem sastoji se od četiri čestice. Energija svake čestice je celobrojni umnožak kvanta energije ε , odnosno $E_i = n\varepsilon$, gde je $n = 0, 1, 2, \dots$. Ako je sistem u termodinamičkoj ravnoteži i ima ukupnu energiju $E = 3\varepsilon$, napisati sve moguće konfiguracije i odrediti verovatnoću da pojedine čestice imaju energije $0, \varepsilon, 2\varepsilon$ i 3ε . Uporediti dobijene verovatnoće sa Boltzmannovom raspodelom.

1.10 Čestice može da bude u jednom od tri stanja $E_1 = -8 \cdot 10^{-21}$ J, $E_2 = 0$ J i $E_3 = 8 \cdot 10^{-21}$ J i u termodinamičkoj je ravnoteži sa rezervoarom na 300 K. Naći partionu funkciju za ovu česticu. Izračunati srednju energiju i disperziju energije čestice.

1.11 Naći transcendentnu jednačinu koja određuje frekvencu ω na kojoj Planck-ova raspodela (1.65) ima maksimalnu vrednost (Wien-ov zakon pomeranja).

1.12 Planeta kruži oko zvezde na udaljenosti $d = 3 \cdot 10^{11}$ m, a luminoznost zvezde je $L = 1,5 \cdot 10^{27}$ J/s. Atmosfera planete apsorbira 80% zračenja koje dolazi sa zvezde, a preostalih 20% zračenja reflektuje. Zanemarujući efekat staklene bašte odrediti temperaturu planete i talasnu dužinu na kojoj ona emituje najviše zračenja. Jedan dan na planeti traje puno kraće od njene godine.

1.13 Napisati kolika je energija koju izrači crno telo u opsegu talasnih dužina $(\lambda, \lambda + d\lambda)$.

1.14 Satelit COBE lansiran je 1989. godine sa zadatkom da posmatra spektar kosmičkog mikrotalasnog pozadinskog zračenja i odredi njegovu temperaturu. Mereći energiju zračenja na različitim talasnim dužinama, ustanovljeno je da mikrotalasnno pozadinsko zračenje ima spektar crnog tela. Odrediti temperaturu tog zračenja ako je na intervalu talasnih dužina širine 0,00833 cm oko talasne dužine 0,133 cm energija izračena u jedinici vremena sa jedinice površine $1,440 \cdot 10^{-7}$ W/m².

1.15 Na litijumsku pločicu pada elektromagnetno polje čije se električno polje menja po zakonu

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \operatorname{Re} \left((1 + \cos \omega t) \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_0 t) \right),$$

gde je \vec{E}_0 konstantan vektor i $\omega = 6 \cdot 10^{14}$ s⁻¹, $\omega_0 = 36 \cdot 10^{14}$ s⁻¹. Naći maksimalnu kinetičku energiju elektrona izbačenih sa ove pločice ako je još poznato da je izlazni rad za litijum $A = 2,39$ eV.

1.16 Za Compton-ovo rasejanje u kome se foton energije $E = \hbar\omega$ rasejava na slobodnom elektronu:

- odrediti energiju fotona rasejanog pod uglom θ ;
- naći kinetičku energiju elektrona posle rasejanja;
- pokazati da ugao rasejanja fotona θ i ugao pod kojim se kreće elektron u odnosu na pravac kretanja inicijalnog fotona φ zadovoljavaju relaciju

$$\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} = \left(1 + \frac{E}{mc^2}\right) \operatorname{tg} \varphi.$$

1.17 Dva fotona promene svoj smer kretanja, prvi tako što se komptonovski raseje na elektronu dva puta po 90° a drugi tri puta pod 60° . Za koliko su promenjene talasne dužine ovih fotona?

1.18 Izvesti Rutherford-ovu formulu (1.74) polazeći od pretpostavke da se α -čestica rasejava u polju nepokretnog jezgra naelektrisanja Ze i da važe zakoni klasične mehanike.

1.19 Rutherford-ov planetarni model atoma je nestabilan što ćemo videti na najjednostavnijem primeru – atomu vodonika. Klasična naelektrisana čestice zrači kada se kreće ubrzano, a po planetarnom modelu elektron se kreće po kružnoj orbiti pa ima ubrzanje. Energija koju elektron izrači u jedinici vremena data je Larmor-ovom formulom

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{e^2 a^2}{c^3}.$$

Ovde je e naelektrisanje, a intenzitet ubrzanja i c brzina svetlosti.

- Pokazati da je gubitak energije elektrona prilikom jednog obilaska jezgra mnogo manji od kinetičke energije elektrona.
- Izračunati vreme potrebno elektronu da sa kružne orbite tipičnog prečnika 1 \AA , krećući se po spirali, padne na jezgro poluprečnika 10^{-14} m . Ovo je "vreme života" atoma vodonika na osnovu planetarnog modela. Prokomentarisati dobijeni rezultat.

1.20 Koristeći pretpostavke Bohr-ovog modela o kvantovanju momenta impulsa na dozvoljenim orbitama čestice mase m koja se kreće u polju centralne sile oblika $\vec{F} = -m\omega^2 \vec{r}$ (gde je \vec{r} vektor položaja čestice i ω ugaona frekvencija), naći uslove kvantovanja poluprečnika orbita, brzina i energija koje čestica ima na dozvoljenim orbitama.

1.21 Pokazati da Sommerfeld-ovo pravilo kvantizacije primenjeno na slučaj Morse-ovog potencijala

$$U(x) = D(e^{-2ax} - 2e^{-ax})$$

daje spektar

$$E_n = -D + a\hbar \sqrt{\frac{2D}{m}} n - \frac{a^2 \hbar^2}{2m} n^2,$$

gde je $n = 0, 1, 2, \dots \leq \sqrt{2mD}/a\hbar$. Veličine D i a su poznate konstante, a m je masa čestice.

1.22 Izmerena energija jonizacije atoma litijuma ($Z = 3$) iznosi 5.39 eV . Koliko je efektivno naelektrisanje koje "vidi" najudaljeniji elektron?

1.23 Mikrotalasna peć generiše elektromagnetno zračenje frekvencije $2,5 \text{ GHz}$ i ima maksimalnu snagu 1000 W . Koliko mikrotalasnih fotona nastane u ovoj peći svake sekunde?

1.24 U eksperimentu iz 1927. godine Davisson i Germer su ustanovili da postoji difrakcija elektrona kinetičke energije $T = 54 \text{ eV}$ koji padaju normalno na kristal nikla i da se prvi difrakcioni maksimum pojavljuje pod uglom $\phi = 50^\circ$. Izračunati talasnu dužinu elektrona ako je poznato da je rastojanje između atoma u kristalu $D = 0.215 \text{ nm}$. Uporediti ovu talasnu dužinu sa de Broglie-evom pretpostavkom.

1.25 Koristeći de Broglie-ev postulat, napisati talasnu jednačinu za slobodnu relativističku česticu mase m (relativistička veza između energije i impulsa je $E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$).

JEDNODIMENZIONNI SISTEMI

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

Osim harmonijskog oscilatora, u ovoj glavi ćemo razmatrati kretanje slobodne čestice, energije i preseke rasejanja jednodimenzionne čestice u pravougaonim potencijalima, kao i neke opšte i karakteristične osobine kvantnomehaničkih sistema u jednoj dimenziji.

2.1 Harmonijski oscilator

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

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

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

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

i zadržimo samo članove u razvoju koji daju najveći doprinos, odnosno prvi i drugi. Naravno, iz uslova da je a minimum sledi da je $U'(a) = 0$ i $U''(a) \geq 0$.

Hamiltonijan jednodimenzionog harmonijskog oscilatora je dat sa

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

a odgovarajuća Schrödinger-ova jednačina glasi

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

gde je $\Psi(x, t)$ talasna funkcija koja opisuje stanje oscilatora i zavisi od prostorne koordinate x i vremena t . Jednačina (2.4) nije jednostavna za rešavanje jer je parcijalna diferencijalna jednačina u kojoj nezavisno promenljiva x figuriše eksplicitno; ali, linearna je po Ψ . Zato prvo tražimo njena partikularna rešenja. Njih možemo da nađemo razdvajanjem promenljivih x i t , tj. pretpostavljajući da je funkcija $\Psi(x, t)$ proizvod oblika

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

Kada uvedemo smenu (2.5), dobijamo

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

tj. jednačinu u kojoj figurišu obični izvodi po vremenu i koordinati. Pošto leva strana od (2.6) zavisi samo od promenljive t a desna samo od promenljive x a jednake su, obe moraju biti jednake konstanti koju ćemo, zbog dimenzija, označiti sa E . Kasnije ćemo videti da je E zaista vrednost energije dobijenog stanja. Tako smo razdvajanjem promenljivih x i t iz parcijalne jednačine (2.4) dobili dve obične diferencijalne jednačine, (2.7) i (2.9). Jednačina za vremenski deo $T(t)$ je jednostavna,

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

i njeno rešenje je eksponencijalna funkcija

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

Druga jednačina, ona koja opisuje prostorni deo talasne funkcije $\psi(x)$, zove se *vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina*. Videćemo da je njeno rešavanje uvek komplikovanije; u ovom slučaju ona glasi

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

Prvi korak u rešavanju vremenski nezavisne Schrödinger-ove jednačine za harmonijski oscilator je da sve dimenzione konstante špakujemo¹ u jednu, uvodeći umesto x bezdimenzionu nezavisno-promenljivu ξ ,

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

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

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

Naravno, linearna smena iz x u ξ ne može suštinski da uprosti jednačinu. Diferencijalne jednačine u kvantnoj mehanici su komplikovanije od jednačina klasične mehanike: kod rešivih sistema rešenja se po pravilu izražavaju preko specijalnih funkcija. Ipak za linearne jednačine drugog reda čiji su koeficijenti polinomi (ili racionalne funkcije) postoje sistematski metodi¹. Jedan od najvažnijih je Frobenius-ov metod kod koga se pretpostavlja rešenje u obliku stepenog reda, i dokazuje njegova egzistencija i jednoznačnost u intervalima između singularnih tačaka jednačine. U kvantnoj mehanici ovaj metod je posebno pogodan jer se analizom rešenja dobijaju i uslovi kvantovanja, tj. dozvoljene vrednosti energije fizičkog sistema. Frobenius-ov metod ukratko je prikazan u dodatku na kraju glave.

¹Klasična referenca za diferencijalne jednačine je E. T. Whittaker and G. N. Watson, *A Course of Modern Analysis*, Cambridge University Press, 1927, ali i E. L. Ince, *Ordinary Differential Equations*, Longmans, London 1927.

Da bismo (2.11) maksimalno pojednostavili, ispitaćemo prvo osobine njenih rešenja u asimptotskim oblastima (u opštem slučaju, u singularnim tačkama). Trebaju nam *fizička rešenja*, i mada ovaj termin još nismo definisali, on između ostalog znači da talasna funkcija $\psi(x)$ ni u jednoj tački ne divergira. U klasičnoj teoriji polja analogan zahtev obezbeđuje da su fizičke veličine kao što su gustina energije ili impuls polja konačne u svim tačkama prostora; u kvantnoj mehanici uslov konačnosti talasne funkcije značiće da gustina verovatnoće nalaženja čestice u svakoj tački ima konačnu vrednost.

U asimptotskoj oblasti tj. za dovoljno veliko ξ imamo da je $\xi^2 \gg 2E/\hbar\omega$, pa u (2.11) prvi član u zagradi možemo da zanemarimo u odnosu na drugi i jednačina postaje

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

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

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

Zamenjujući izraz (2.13) u jednačinu (2.11) dobijamo jednačinu za funkciju $f(\xi)$

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

gde smo sa λ označili

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

Pokažimo da postoji rešenje od (2.14) čiji razvoj u Taylor-ov red

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

konvergira: radijus konvergencije nećemo određivati. Iz

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

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

zamenom u (2.14) dobijamo

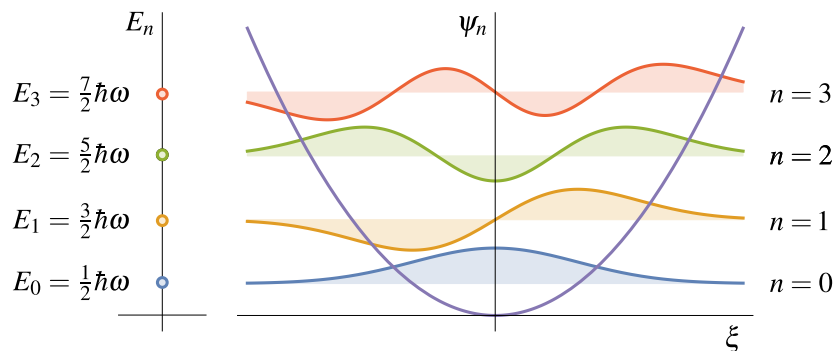
$$\sum_{k=0}^{\infty} \left((k+2)(k+1) a_{k+2} - (2k-\lambda) a_k \right) \xi^k = 0. \quad (2.19)$$

Poslednja jednakost treba da bude zadovoljena za proizvoljne vrednosti promenljive ξ i zato svi koeficijenti uz ξ^k moraju da budu identički nula. Znači, a_k zadovoljavaju rekurentnu relaciju

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

koja određuje rešenja Schrödinger-ove jednačine (2.14) za fiksiranu vrednost λ . Vidimo, primenom rekurentne relacije, da svi parni koeficijenti a_{2k} mogu da se izraze preko a_0 a neparni a_{2k+1} preko a_1 , što je u skladu sa činjenicom da je (2.14) obična diferencijalna jednačina drugog reda pa njena rešenja imaju dve integracione konstante.

Slika 2.1: Spektar i prva četiri stanja $\psi_n(\xi)$ harmonijskog oscilatora.



Asimptotsko ponašanje funkcije $f(\xi)$ se prenosi na ponašanje koeficijenata a_k za $k \rightarrow \infty$. Za velike, na primer parne stepene, iz relacije (2.20) dobijamo približno

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

Takvo ponašanje imaju koeficijenti u razvoju funkcije e^{ξ^2} : ova činjenica nije iznenađujuća i znači da smo u stvari dobili talasnu funkciju koja ima asimptotiku

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

odnosno rešenja koja smo smenom (2.13) hteli da odbacimo kao nefizička: to su generička rešenja od (2.14) koja odgovaraju proizvoljnim vrednostima λ . Međutim, naš postupak daje i fizička rešenja Schrödinger-ove jednačine tj. ona koja se asimptotski ponašaju kao $e^{-\frac{\xi^2}{2}}$. Ona se dobijaju ako se red (2.16) prekine na nekoj konačnoj vrednosti indeksa n , pa funkcija $f(\xi)$ postane polinom; naravno, koeficijenti polinoma i dalje zadovoljavaju (2.20). Ovakva rešenja u beskonačnosti konvergiraju jer eksponent opada brže nego što polinomijalna funkcija raste. Lako se vidi da uslov

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

"odseca" red (2.16) na n -tom članu, jer su zbog (2.20) zajedno sa a_{n+2} i svi koeficijenti a_{n+4} , a_{n+6} , ... jednaki nuli. Jasno, (2.23) obezbeđuje da se anuliraju samo koeficijenti iste parnosti kao n , i da bi se red sveo na polinom treba dodatno da pretpostavimo da su svi koeficijenti suprotne parnosti nula (dva uslova oblika (2.23) za različito n bila bi kontradiktorna). Tako za parno n uz uslov (2.23) dodajemo $a_1 = 0$, iz koga sledi $a_{2k+1} = 0$. Analogno, ako je u (2.23) n neparno, dodaćemo $a_0 = 0$.

Dobili smo dakle beskonačno mnogo fizičkih rešenja: za svaki prirodan broj uslov (2.23) i rekurentna relacija (2.20) definišu jedan polinom stepena n , $H_n(\xi)$, odgovarajuću energiju E_n i talasnu funkciju ψ_n ,

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

Polinomi $H_n(\xi)$ zovu se *Hermité-ovi polinomi* i kao što smo videli, parni su ili neparni. Osim stepena polinoma n , uslov (2.23) fiksira vrednost konstante $\lambda (= 2n)$, odnosno energije E_n

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

Ovaj uslov znači da je energija harmonijskog oscilatora *kvantovana*, odnosno da ima diskretne vrednosti; za sve druge λ formalna rešenja zapisana u obliku razvoja (2.16) su nefizička. E_n su, do na sabirak $\hbar\omega/2$, upravo vrednosti koje je Planck postulirao. Konstante A_n su date sa

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \quad (2.26)$$

i objasnimo ih kasnije.

Stanje koje ima najnižu energiju, $\psi_0(x)$, dobija se za $n = 0$ i naziva se *osnovno stanje*. Njemu odgovara talasna funkcija koja je Gauss-ov paket, jer je polinom nultog stepena $H_0(\xi) = \text{const}$,

$$\psi_0(\xi) = \pi^{-1/4} e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega. \quad (2.27)$$

Treba zapaziti da ni u osnovnom stanju energija harmonijskog oscilatora nije nula: to je, videćemo kasnije, u skladu sa Heisenberg-ovim relacijama neodređenosti a potpuno različito od ponašanja klasičnog oscilatora. Sledeće stanje po energiji, *prvo pobuđeno stanje* je

$$\psi_1(\xi) = (4\pi)^{-1/4} 2\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad E_1 = \frac{3}{2} \hbar\omega. \quad (2.28)$$

Drugo i treće pobuđeno stanje su

$$\begin{aligned} \psi_2(\xi) &= (64\pi)^{-1/4} (4\xi^2 - 2) e^{-\frac{\xi^2}{2}}, & E_2 &= \frac{5}{2} \hbar\omega, \\ \psi_3(\xi) &= (2304\pi)^{-1/4} (8\xi^3 - 12\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}, & E_3 &= \frac{7}{2} \hbar\omega. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Skup dozvoljenih vrednosti energije (odnosno, bilo koje fizičke veličine) naziva se *spektar*: spektar energije harmonijskog oscilatora je skup ekvidistantnih tačaka, (2.25).

2.2 Vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina

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

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}). \quad (2.30)$$

Schrödinger-ova jednačina je

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(\vec{r}) \Psi, \quad (2.31)$$

pri čemu talasna funkcija zavisi od vremena i prostornih koordinata, $\Psi = \Psi(\vec{r}, t)$. Pošto potencijalna energija ne zavisi od vremena, partikularna rešenja se mogu uzeti u obliku

$$\Psi(\vec{r}, t) = T(t) \psi(\vec{r}). \quad (2.32)$$

Uvođenjem smene (2.32) dobijamo

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

U poslednjoj formuli promenljive su razdvojene i jednačina je tačna samo ako su leva i desna strana jednake (istoj) konstanti. Znači, iz polazne diferencijalne jednačine (2.31) dobijamo dve od kojih je jedna obična,

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

a druga ostaje parcijalna jednačina po koordinatama ali ne sadrži vreme: to je *vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina*²:

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

Kao što smo rekli, izrazu $-\frac{\hbar^2\Delta}{2m}$ odgovara kinetička energija, tako da sa leve strane jednačine (2.35) prepoznamo hamiltonijan, $H = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + U(\vec{r}) = T + U$. Zato se ona piše i kao

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

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

Od para razdvojenih jednačina (2.34-2.35) prva je jednostavna i njeno rešenje je

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

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

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

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

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

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

Ono nije stacionarno jer je fazni faktor svakog od sabiraka u sumi (integralu) različit. U izrazu (2.39) imamo dve vrste šabiranja" rešenja: u prvom članu to je po indeksu n , kada su vrednosti energije E_n , kao kod harmonijskog oscilatora, diskretne. Međutim može da se desi da vrednosti u spektru energije budu i kontinualne (ili samo kontinualne, na primer kod slobodne čestice), i tada je linearna kombinacija talasnih funkcija ψ_E u stvari integral po dE . U opštem rešenju (2.39) konstante c_n i c_E koje daju relativni udeo odnosno težinu pojedinog partikularnog rešenja su proizvoljne. One su određene početnim uslovom, stanjem sistema u nekom zadatom trenutku npr. u $t = 0$. Činjenica da se iz proizvoljnog početnog stanja $\psi(\vec{r})$

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

mogou jednoznačno odrediti koeficijenti u razvoju c_n i c_E je veoma netrivialan iskaz iz funkcionalne analize: ova formula u linearnoj algebri odgovara jednoznačnosti razvoja proizvoljnog vektora po bazu. Mi naravno nećemo ulaziti u dokaze odgovarajućih matematičkih teorema u opštem slučaju, ali ćemo na primerima pokazati kako invertovanje formule (2.40) i određivanje koeficijenata c_n , c_E funkcioniše.

Da sumiramo: vremenski deo Schrödinger-ove jednačine se za konzervativne sisteme rešava jednostavno, pa je najvažniji deo većine kvantnomehaničkih problema – vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina.

²Ili u narodu poznatija kao stacionarna Schrödinger-ova jednačina, kako je na ispitu naglasio Damir Ribić, student iz Šipova.

2.3 Jednačina kontinuiteta

Schrödinger-ova jednačina je diferencijalna jednačina prvog reda po vremenu. Zato se jedna od njenih posledica može napisati u obliku jednačine kontinuiteta,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0. \quad (2.41)$$

Naime, kompleksnom konjugacijom (2.31) dobijamo, koristeći da je potencijalna energija realna funkcija, $U = U^*$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^* + U \Psi^*, \quad (2.42)$$

pa kad (2.31) pomnožimo sa Ψ^* a (2.42) sa Ψ i oduzujemo, dobijamo

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) - \frac{i\hbar}{2m} \operatorname{div} (\Psi^* \operatorname{grad} \Psi - \Psi \operatorname{grad} \Psi^*) = 0. \quad (2.43)$$

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

$$\rho = \Psi^* \Psi, \quad \vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*). \quad (2.44)$$

Podsetimo se da je važenje jednačine kontinuiteta vezano za zakon održanja: u mehanici fluida na primer održava se ukupna masa, u elektrodinamici ukupno naelektrisanje. Konstanta kretanja koja se dobija iz (2.43) je integral $\int \rho dV$. Razume se, on ne zavisi od vremena,

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

jer su vrednosti talasne funkcije na granici odnosno u asimptotskoj oblasti jednake nuli.

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

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

interpretira se kao *gustina verovatnoće* nalaženja čestice: $dP = \rho(\vec{r}, t) dV$ je verovatnoća da se u trenutku t čestica nađe u zapremini dV oko tačke \vec{r} . Smisao održanja "naboja" $\int \rho dV$ je da, ako u nekom trenutku npr. $t = 0$, je ukupna verovatnoća nalaženja čestice (bilo gde u prostoru) normirana na jedinicu,

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

onda se zbog (2.45) to normiranje u toku vremena održava, odnosno i u svim kasnijim i prethodnim trenucima $\rho(\vec{r}, t)$, je raspodela verovatnoće. Interesantno je da je Schrödinger već u svom prvom radu iz 1926. interpretirao $|\Psi|^2$ pretpostavljajući da u atomu vodonika $e|\Psi|^2$ opisuje gustinu naelektrisanja elektrona. Jednačina kontinuiteta važi i za višestruke sisteme i interpretira se kao zakon održanja broja čestica u kvantnomehaničkim procesima. Za njeno izvođenje, videli smo, koristi se uslov realnosti potencijala, $U = U^*$. Zato se u fenomenološkom opisu procesa u kojima čestice nestaju (na primer apsorpcijom) ili se stvaraju, koriste kompleksni potencijali.

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

$$\langle x \rangle = \int x \rho dV, \quad (2.48)$$

a očekivana vrednost odgovarajuće komponente brzine v_x ,

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

Primenjujući u ovom izrazu jednačinu kontinuiteta (2.43) imamo

$$\langle v_x \rangle = - \int x \left(\frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z} \right) dV,$$

i posle parcijalne integracije i odbacivanja površinskog člana dobijamo da je

$$\langle v_x \rangle = - \frac{i\hbar}{2m} \int (\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}) dV = \int j_x dV. \quad (2.50)$$

Veličina

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

je *fluks verovatnoće* i određuje srednju vrednost brzine čestice. Ako talasnu funkciju napišemo, kao svaki kompleksni broj, kao proizvod amplitude $A(\vec{r}, t)$ i faze $\phi(\vec{r}, t)$,

$$\Psi = A e^{i\hbar\phi} = \sqrt{\rho} e^{i\hbar\phi} \quad (2.51)$$

gde su $A(\vec{r}, t)$ i $\phi(\vec{r}, t)$ realne funkcije, za fluks verovatnoće dobijamo

$$\vec{j} = \frac{\rho}{m} \nabla \phi. \quad (2.52)$$

Fluks verovatnoće je druga važna karakteristika talasne funkcije i kao što vidimo, zavisi od gradijenta njene faze.

Normiranje verovatnoće ima jednu jednostavnu posledicu: da bi integral $\int |\Psi|^2 dV$ bio konačan, neophodno je da u prostornoj beskonačnosti talasna funkcija teži nuli. Ovo je uslov koji smo već koristili kod rešavanja Schrödinger-ove jednačine za harmonijski oscilator. Funkcije za koje je integral $\int |\Psi|^2 dV$ konačan zovu se kvadratno integrabilne funkcije i one zapravo čine *prostor stanja* kvantne čestice. Očigledno, ako je integral konačan onda se reskaliranjem Ψ može normirati na jedinicu. Uslov konvergencije integrala (2.47) daje i tip opadanja talasne funkcije u beskonačnosti: u jednoj dimenziji, $|\Psi|$ mora da opada brže nego $x^{-1/2}$, dok u tri dimenzije $|\Psi|$ mora da opada brže od $r^{-3/2}$.

2.4 Slobodna čestica

Razmotrimo sada detaljnije najjednostavniji fizički sistem, slobodnu česticu. Schrödinger-ova jednačina je

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi. \quad (2.53)$$

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

Ako stacionarnu Schrödinger-ovu jednačinu

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = E\psi \quad (2.54)$$

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

$$\psi(\vec{r}) = X(x)Y(y)Z(z), \quad (2.55)$$

i ponavljanjem postupka razdvajanja, dobijamo tri jednačine

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{dx^2} = E_x X, \quad \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Y}{dy^2} = E_y Y, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Z}{dz^2} = E_z Z, \quad (2.56)$$

gde su E_x, E_y, E_z pozitivne konstante koje zadovoljavaju uslov $E_x + E_y + E_z = E$. Sve tri jednačine su homogene sa konstantnim koeficijentima, i zato su njihova partikularna rešenja eksponencijalne funkcije. Pretpostavljajući da je rešenje za $X(x)$ oblika $X = e^{ik_x x}$, vidimo da k_x zadovoljava

$$k_x^2 = \frac{2mE_x}{\hbar^2}, \quad (2.57)$$

odnosno, de Broglie-jevu disperzionu relaciju. Za istu vrednost energije E_x imamo dva različita, linearno nezavisna³ stanja

$$X_1(x) = e^{ik_x x}, \quad X_2(x) = e^{-ik_x x} \quad (2.58)$$

pa kažemo da je energija *dvostruko degenerisana*. Ova stanja su ravni talasi. U jednoj dimenziji, talas

$$\Psi_1(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_x t} X_1(x) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_x t + ik_x x} \quad (2.59)$$

se prostire u pozitivnom smeru x -ose, a

$$\Psi_2(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_x t} X_2(x) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_x t - ik_x x} \quad (2.60)$$

u negativnom smeru x -ose. Množenjem funkcija $X(x), Y(y)$ i $Z(z)$ dobija se ravan talas u tri dimenzije,

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = e^{-i\omega t + i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (2.61)$$

gde je

$$\hbar\omega = E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (2.62)$$

U ovom slučaju degeneracija energije je beskonačna jer imamo beskonačno mnogo stanja iste energije koji se razlikuju samo pravcem talasnog vektora \vec{k} .

Međutim, ravni talasi nisu fizička stanja u smislu u kome smo stanja malopre definisali jer ne mogu da se normiraju na jedinicu,

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

Gustina verovatnoće za ravan talas je u svim tačkama ista. Sličan problem imamo i kod klasičnog ravnog elektromagnetnog talasa, kod koga je gustina energije u svim tačkama konstantna pa je ukupna energija talasa beskonačna. Fizička stanja u prirodi uvek su talasni paketi koji su lokalizovani u prostoru a nemaju precizno određenu frekvencu. Ravni talasi (2.61) su matematička idealizacija, veoma korisna za račun ali i za intuiciju: gustina fluksa ravnog talasa, iz (2.52), je

$$\vec{j} = \frac{\hbar \vec{k}}{m}. \quad (2.64)$$

³Funkcije $f(x)$ i $g(x)$ su linearno nezavisne ako njihov vronskijan $W(f, g) = fg' - f'g = \begin{vmatrix} f & g \\ f' & g' \end{vmatrix}$ nije identički nula. Za n funkcija f_1, \dots, f_n , vronskijan je $n \times n$ determinanta čija je prva vrsta f_1, \dots, f_n , a ostale izvodi funkcija od prvog do $(n-1)$ -vog reda; $W(f_1, \dots, f_n) \neq 0$ opet znači da su funkcije linearno nezavisne.

2.5 Evolucija slobodnog Gauss-ovog paketa

U nastavku ćemo razmatrati slobodnu česticu u jednoj dimenziji. Rekli smo da su njena fizička rešenja *talasni paketi*

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k) e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t + ikx} dk. \quad (2.65)$$

Izraz (2.65) je rešenje Schrödinger-ove jednačine, jer je dobijen kao zbir "partikularnih rešenja (2.61) pomnoženih koeficijentima $c(k)$ koji ne zavise od x i t . Rešenje (2.65) je opšte rešenje: to znači da se stanje proizvoljne početne konfiguracije $\psi(x) \equiv \Psi(x, 0)$ može prikazati u obliku (2.65),

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k) e^{ikx} dk, \quad (2.66)$$

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

$$c(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx. \quad (2.67)$$

Fizička stanja uvek normiramo na jedinicu. Normiranje daje uslov na koeficijente

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \iint_{-\infty}^{+\infty} dk dk' c^*(k') c(k) e^{-i(k'-k)x} = 2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} dk |c(k)|^2 = 1. \quad (2.68)$$

Poslednji izraz kao i normalizaciju ravnih talasa ćemo izvesti u sledećoj glavi, gde ćemo videti da je Fourier-ove koeficijente možda prirodnije uvesti na simetričan način,

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

Talasnim paketom najčešće zovemo ne potpuno proizvoljnu funkciju $\psi(x)$, već funkcije koje su *lokalizovane* tj. imaju relativno uzak maksimum oko određene vrednosti položaja x_0 . Tipično, takve funkcije se dobijaju kada je raspodela po talasnom broju $c(k)$ lokalizovana oko neke vrednosti k_0 sa širinom δk , tj. ako $c(k)$ brzo opada u nulu van intervala $(k_0 - \delta k, k_0 + \delta k)$. Ako sa ϕ označimo fazu pod integralom u izrazu (2.65), $\phi = kx - \omega t$, imamo

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \delta k}^{k_0 + \delta k} c(k) e^{i\phi} dk. \quad (2.70)$$

Poslednji izraz može da se razmatra i za proizvoljnu zavisnost $\omega = \omega(k)$. Trigonometrijska funkcija $e^{i\phi}$ osciluje, pri čemu se pozitivne i negativne vrednosti brzo smenjuju: u oblastima gde se faza $\phi(k)$ menja mnogo brže od amplitude $c(k)$, integracija po k daje malu ili zanemarljivu vrednost za funkciju Ψ . Faza se najsporije menja u okolini ekstremuma: zato je tu vrednost funkcije Ψ najveća. Prema tome, maksimum od $\Psi(x, t)$ je u tački K određenoj sa

$$\frac{d}{dk}(kx - \omega t) = 0, \quad (2.71)$$

odnosno

$$x = \frac{d\omega}{dk} t = v_g t. \quad (2.72)$$

Veličina $v_g = \frac{d\omega}{dk}|_{k=K}$ naziva se *grupna brzina* talasnog paketa. Vidimo da je npr. kod elektromagnetnog talasa grupna brzina uvek jednaka brzini svetlosti,

$$\omega = ck, \quad v_g = c, \quad (2.73)$$

dok je kod slobodne kvantne čestice

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}, \quad v_g = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}. \quad (2.74)$$

Zbog kvadratne relacije (2.74), oblik talasa koji opisuje kvantnu česticu se u toku vremena menja: ova pojava se naziva *dispersija*. Proučicemo je detaljnije na primeru Gauss-ovog paketa.

Želimo da ispitamo evoluciju stanja koje je u početnom trenutku opisano Gauss-ovom raspodelom,

$$\psi(x) = \Psi(x, 0) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x}. \quad (2.75)$$

Odgovarajuća gustina verovatnoće je

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = |A|^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}}, \quad (2.76)$$

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

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

Vidimo da je raspodela (2.76) simetrična oko svog maksimuma u nuli. Izračunajmo srednju vrednost i disperziju koordinate x u stanju (2.75). Za srednju vrednost u početnom trenutku dobijamo

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

pa je nula i najverovatnija i očekivana vrednost koordinate. Srednja vrednost kvadrata x^2 je

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

tako da je kvadrat disperzije Δx ,

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

Konstanta a opisuje neodređenost merenja koordinate i proporcionalna je širini Gauss-ovog paketa na polovini visine. Za gustinu struje, sa druge strane, imamo

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

pa je

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

srednja brzina talasnog paketa u početnom trenutku.

Da bismo odredili kako Gauss-ov paket evoluirá, treba da nađemo talasnu funkciju $\Psi(x, t)$ u kasnijim trenucima, odnosno da odredimo koeficijente $c(k)$ u razvoju (2.65). Pošto koeficijenti ne zavise od vremena možemo ih izračunati u $t = 0$ inverznom Fourier-ovom transformacijom:

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

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

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

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

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

I poslednji integral je Poisson-ov mada su sada koeficijenti kompleksni brojevi. Kada se izraz sredi dobijamo talasnu funkciju

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

i odgovarajuću gustinu verovatnoće

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

Ako izračunamo srednje vrednosti $\langle x(t) \rangle$ i $\langle x(t)^2 \rangle$ vidimo da se vrh talasnog paketa, u skladu sa (2.82), kreće kao klasična čestica, konstantnom brzinom v_0 ,

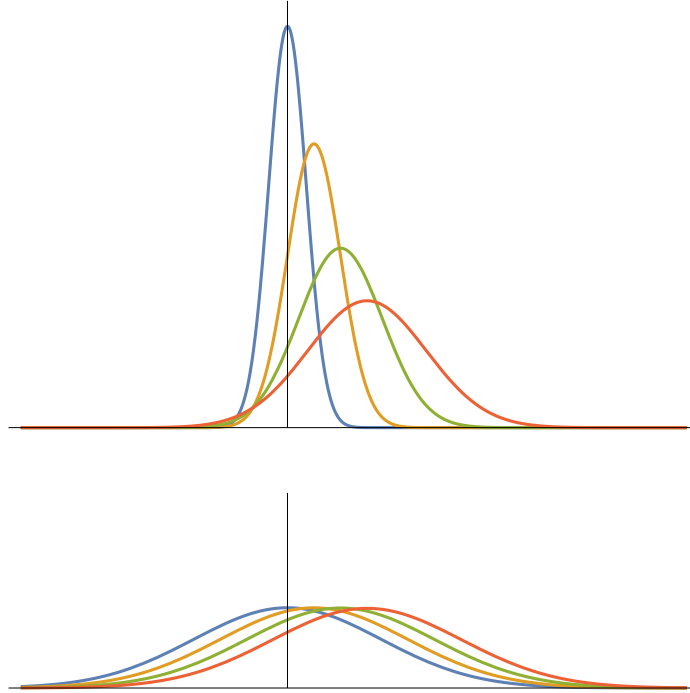
$$\langle x(t) \rangle = v_0 t. \quad (2.88)$$

Uz to, talasni paket se širi jer disperzija položaja raste sa vremenom,

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

Gauss-ov paket je jedno od karakterističnih stanja slobodne čestice pa ćemo se na njemu još malo zadržati. Kao što smo rekli, stanje čestice u tri dimenzije opisuje se talasnom funkcijom $\Psi(\vec{r}, t)$, dok se rezultati vezani za merenje njenog položaja dobijaju iz gustine verovatnoće $\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$. To znači da je opis koji imamo *inherentno statistički*: rezultat eksperimenta zapravo je raspodela verovatnoće ishoda pojedinačnih merenja, i merenje se nužno vrši na ansamblu istih, identično pripremljenih sistema. Za neka stanja može se naravno desiti da se pri merenju uvek dobije isti rezultat, odnosno da je raspodela verovatnoće Kronecker-ova delta; ali po pravilu, rezultati se u pojedinačnim merenjima razlikuju.

Činjenica da je opis kvantnih sistema statistički ne znači da on nije *deterministički*. Evolucija kvantnog sistema zadata je Schrödinger-ovom jednačinom, i ako znamo talasnu funkciju u početnom trenutku vremena, iz Schrödinger-ove jednačine je možemo odrediti u svim kasnijim trenucima. Samim tim možemo da odredimo i gustinu verovatnoće u proizvoljnom



Slika 2.2: Evolucija Gauss-ovog paketa, dobro lokalizovanog (gore) i slabo lokalizovanog (dole), u nekoliko uzastopnih vremenskih trenutaka.

trenutku i prema tome, da predvidimo rezultate svih eksperimenata. Ono što međutim ne možemo da predvidimo, zbog statističkog opisa, su rezultati *pojedinačnih* merenja.

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

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

Određimo srednje vrednosti funkcija brzine i impulsa čestice. Za brzinu smo dobili

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

odnosno

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

Oblik ove očekivane vrednosti analogan je sa (2.90)

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \Psi^* \hat{p} \Psi d^3 r, \quad (2.93)$$

ako impulsu \vec{p} "pridružimo" operator nabra,

$$\vec{p} \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \nabla, \quad (2.94)$$

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

$$\langle \vec{p}^2 \rangle = \int \Psi^* (-i\hbar \nabla)^2 \Psi d^3 r = -\hbar^2 \int \Psi^* (\Delta \Psi) d^3 r, \quad (2.95)$$

gde je Δ Laplace-ov operator.

Izračunajmo neodređenost impulsa za Gauss-ov paket (2.75), u početnom trenutku. Već smo dobili $\langle p \rangle$,

$$\langle p \rangle = -i\hbar |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2a^2} - ik_0 x} \left(-\frac{x}{a^2} + ik_0 \right) e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x} dx = \hbar k_0, \quad (2.96)$$

a srednja vrednost kvadrata impulsa je

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx = \hbar^2 k_0^2 + \frac{\hbar^2}{2a^2}. \quad (2.97)$$

Prema tome,

$$(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{2a^2}, \quad (2.98)$$

pa je proizvod neodređenosti impulsa i koordinate kod Gauss-ovog paketa

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \quad (2.99)$$

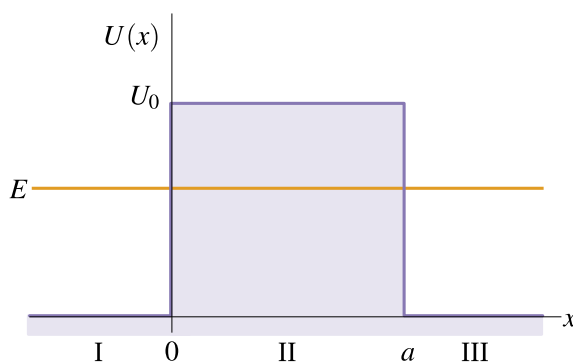
Ovo je najmanja vrednost proizvoda $\Delta x \Delta p$ koju Heisenberg-ove relacije neodređenosti dozvoljavaju, što ćemo videti u sledećoj glavi. Stanja kod kojih je proizvod neodređenosti impulsa i koordinate minimalan nazivaju se *koherentna stanja* i predstavljaju kvantna stanja sistema koja su najpribližnija njegovom klasičnom opisu.

2.6 Rasejanje na potencijalnoj barijeri, koeficijenti refleksije i transmisije

Videli smo u prethodna dva poglavlja koliko je lakše rešiti Schrödinger-ovu jednačinu za slobodnu česticu nego za harmonijski oscilator. To je zato što u prvoj nemamo eksplicitnu zavisnost od x pa diferencijalna jednačina ima konstantne koeficijente. Slični po jednostavnosti su problemi kretanja čestice u pravougaonim potencijalima: takvi potencijali često predstavljaju dobru ili bar prvu aproksimaciju za mnoge fizičke probleme, i na njima ćemo upoznati neke od najvažnijih osobina kvantnih sistema.

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

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & 0 < x < a \\ 0, & x > a \end{cases}. \quad (2.100)$$



Slika 2.3: Potencijalna barijera.

Već smo kod opisa Rutherford-ovog eksperimenta uveli tipičnu postavku problema rasejanja. Pravolinijski i monoenergetski snop čestica sudara se sa metom, pri čemu je njihova interakcija opisana potencijalom $U(x)$. Potencijal mete je lokalizovan oko centra rasejanja (npr. oko tačke $x = 0$), što znači da je $U(x) \neq 0$ samo u određenom delu prostora linearne dimenzije a . Izvor čestica se nalazi na velikom rastojanju od mete gde je potencijal nula, pa se može uzeti da upadni snop u toj, asimptotskoj oblasti ima dobro definisan impuls: kvantno, talasna

funkcija upadnog snopa ψ_{in} je ravan talas. Pri sudaru, talasna funkcija čestice se menja, evoluira. U trenutku detekcije (koja se takođe vrši na velikom rastojanju od mete), da bi se odredila raspodela rasejanih čestica u zavisnosti od uglova rasejanja, rasejani talas ψ_{out} se razvija po ravnim talasima i taj razvoj daje osnovnu karakteristiku rasejanja, njegov *diferencijalni presek*.

Pošto u jednoj dimenziji imamo samo dva moguća ugla rasejanja, 0 i π , presek rasejanja je opisan sa dve vrednosti: koeficijentom transmisije (prolaza) T i koeficijentom refleksije (odbijanja) R . Koeficijent transmisije definiše se kao odnos gustina fluksa transmitovanog i fluksa upadnog snopa (talasa), a koeficijent refleksije kao odnos gustina fluksa reflektovanog i fluksa upadnog talasa. Kao i u klasičnoj mehanici, kod elastičnog rasejanja održava se energija. Zbog toga, kad računamo presek rasejanja ne moramo da pratimo vremensku evoluciju upadnog talasa: dovoljno je da nađemo stacionarno rešenje Schrödinger-ove jednačine za fiksiranu vrednost energije $E > 0$ i graničnim uslovima koji odgovaraju eksperimentu, i odredimo koeficijente refleksije i transmisije odnosno diferencijalni presek.

Potencijal (2.100) koji analiziramo je deo po deo konstantan, pa Schrödinger-ovu jednačinu možemo da rešavamo posebno u oblastima $x < 0$ (I), $x \in (0, a)$ (II) i $x > a$ (III), a zatim da ova rešenja glatko spojimo. Uslovi spajanja, ili u žargonu, "žašivanja" rešenja su sledeći. Bez obzira na oblik potencijala, *talasna funkcija je neprekidna* u svakoj tački x , tj.

$$\forall x: \quad \psi(x+0) = \psi(x-0). \quad (2.101)$$

Ovaj uslov je fizički, i znači da se gustina verovatnoće u bliskim tačkama mnogo ne razlikuje. Drugi uslov je uslov *neprekidnosti prvog izvoda* talasne funkcije, i on direktno sledi iz Schrödinger-ove jednačine: izvešćemo ga u jednodimenzionom slučaju. Razmotrimo ponašanje rešenja $\psi(x)$ u proizvoljnoj tački x :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (2.102)$$

Integriramo ovu jednačinu u intervalu $(x-\epsilon, x+\epsilon)$,

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

i oceniti vrednosti pojedinih sabiraka. Vrednost prvog integrala je

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

dok druga dva možemo da ocenimo pomoću teoreme o srednjoj vrednosti:⁴

$$\begin{aligned} \int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} U(x)\psi(x) dx &= 2\epsilon U(x_1)\psi(x_1), & x_1 \in (x-\epsilon, x+\epsilon) \\ \int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} \psi(x) dx &= 2\epsilon \psi(x_2), & x_2 \in (x-\epsilon, x+\epsilon). \end{aligned} \quad (2.105)$$

U limesu $\epsilon \rightarrow 0$ drugi i treći član se anuliraju jer su proporcionalni sa ϵ , pa iz (2.103) dobijamo

$$\psi'(x+0) = \psi'(x-0), \quad (2.106)$$

⁴Teorema o srednjoj vrednosti kaže da postoje tačke x_1 i x_2 u intervalu $(x-\epsilon, x+\epsilon)$ takve da su jednačine (2.105) zadovoljene, pod uslovom da su potencijal $U(x)$ i talasna funkcija $\psi(x)$ u razmatranom intervalu konačni.

odnosno, neprekidnost prvog izvoda. Uslovi (2.101) i (2.106) često se zajednički iskazuju kao *neprekidnost logaritamskog izvoda*

$$(\log \psi)'(x+0) = (\log \psi)'(x-0). \quad (2.107)$$

Poslednji uslov je za primenu često jednostavniji a zapravo ima isti sadržaj kao (2.101) i (2.106). Videćemo uskoro da kod potencijala koji imaju beskonačan skok u nekoj tački, na primer za $U(x) = U_0 \delta(x)$, prvi izvod talasne funkcije ne zadovoljava uslov neprekidnosti.

Vratimo se rešavanju Schrödinger-ove jednačine. Potrebno je da rešimo ovu jednačinu u svakoj od oblasti I, II i III za istu energiju E i da onda dobijene funkcije glatko spojimo na granicama oblasti. U oblasti I, $x < 0$, imamo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' - E\psi = 0, \quad (2.108)$$

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

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (2.109)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + (U_0 - E)\psi = 0. \quad (2.110)$$

Rešavaćemo prvo fizički zanimljiviji slučaj kad je energija čestice manja od visine barijere, $E < U_0$. Pošto je $E - U_0$ negativno, rešenja nisu trigonometrijske već eksponencijalne funkcije,

$$\psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (2.111)$$

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

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}, & 0 < x < a \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}, & x > a \end{cases} \quad (2.112)$$

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

U rešenju (2.112), odnosno u

$$\Psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi(x) \quad (2.113)$$

nije teško prepoznati šta je upadni, a šta reflektovani i transmitovani talas. Njih određuju asimptotske oblasti $x = \pm\infty$, tj. oblasti u kojima je čestica približno slobodna: sabirci proporcionalni sa e^{ikx} su ravni talasi impulsa $\hbar k$ tj. koji se kreću se s leva na desno, a sabirci proporcionalni sa e^{-ikx} su talasi impulsa $-\hbar k$. Prema tome, možemo da identifukujemo upadni, reflektovani i transmitovani talas

$$\psi_{in} = Ae^{ikx}, \quad \psi_R = Be^{-ikx}, \quad \psi_T = Fe^{ikx}, \quad (2.114)$$

ako pretpostavimo da je izvor snopa čestica u $x = -\infty$ a detektor u $x = +\infty$; sem toga treba da nametnemo granični uslov $G = 0$. Uslovi neprekidnosti u $x = 0$ i $x = a$ glase

$$\begin{aligned} A + B &= C + D, & ik(A - B) &= \kappa(C - D) \\ Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a} &= Fe^{ika}, & \kappa(Ce^{\kappa a} - De^{-\kappa a}) &= ikFe^{ika}. \end{aligned} \quad (2.115)$$

Ako uvedemo $\alpha = (\kappa - ik)/(\kappa + ik)$, imamo

$$\begin{aligned} A + \alpha B &= e^{-\kappa a + ika} F \\ A + \frac{1}{\alpha} B &= e^{\kappa a + ika} F, \end{aligned} \quad (2.116)$$

pa iz poslednje dve jednačine dobijamo

$$e^{ika} F = \frac{-2ik\kappa}{(\kappa^2 - k^2) \sinh \kappa a - 2ik\kappa \cosh \kappa a} A, \quad (2.117)$$

$$B = -\frac{(\kappa^2 + k^2) \sinh \kappa a}{(\kappa^2 - k^2) \sinh \kappa a - 2ik\kappa \cosh \kappa a} A. \quad (2.118)$$

Koeficijent transmisije dat je odnosom gustina struja verovatnoće

$$T = \frac{|j_T|}{|j_{in}|}, \quad (2.119)$$

a za ravan talas $\psi_{in} = Ae^{ikx}$ fluks verovatnoće je proporcionalan njegovoj brzini,

$$j_{in} = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}. \quad (2.120)$$

Prema tome, za koeficijent transmisije dobijamo

$$T = \frac{k|F|^2}{k|A|^2} = \frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2 \cosh^2 \kappa a + (\kappa^2 - k^2)^2 \sinh^2 \kappa a} = \frac{4E(U_0 - E)}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \sinh^2 \kappa a}, \quad (2.121)$$

i slično za koeficijent refleksije,

$$R = \frac{k|B|^2}{k|A|^2} = \frac{(\kappa^2 + k^2)^2 \sinh^2 \kappa a}{4k^2\kappa^2 \cosh^2 \kappa a + (\kappa^2 - k^2)^2 \sinh^2 \kappa a} = \frac{U_0^2 \sinh^2 \kappa a}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \sinh^2 \kappa a}. \quad (2.122)$$

Da proanaliziramo rezultat. Rešavanjem Schrödinger-ove jednačine za potencijalnu barijeru (2.100) nismo dobili ograničenja na vrednosti energije (osim $E > 0$, što ćemo komentarisati kasnije), što znači da je spektar energije kontinualan i sadrži sve tačke iz intervala $(0, \infty)$. U skladu sa tim, stacionarna rešenja ne opadaju u nulu nego su, asimptotski, ravni talasi. Da bismo našli koeficijent prolaza zadali smo granični uslov $G = 0$, tj. pretpostavili smo da je izvor čestica u $x = -\infty$; onda smo iz uslova neprekidnosti odredili konstante B i F ; poslednja konstanta A dobija se iz normalizacije talasne funkcije. Odnosi B/A i F/A određuju koeficijente refleksije i transmisije. Vidimo da je $R + T = 1$, što znači da se upadni talas delom reflektuje a delom prolazi kroz barijeru a ukupni fluks se održava. Ono što je u odnosu na klasičnu mehaniku novo je, da čestica može da prođe kroz barijeru i kada je njena energija manja od visine barijere, $E < U_0$. Ovaj kvantni fenomen naziva se *tunel efekat*.

Za $U_0 \gg E$ koeficijent prolaza je mali,

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

Iz (2.121) se vidi da koeficijent transmisije osim od odnosa U_0 i E zavisi i od širine barijere a . Izvedimo približnu formulu za T kada je $\kappa a \gg 1$, odnosno $\sinh \kappa a \approx e^{\kappa a}/2$. Dobijamo

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

T je proporcionalan eksponentu $e^{-2\gamma}$, gde je γ faktor Gamow-a,

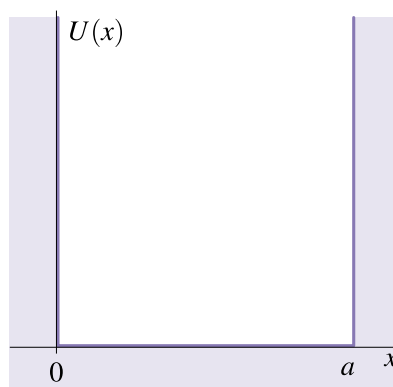
$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx, \quad p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}, \quad (2.125)$$

i dobićemo ga kasnije iz WKB aproksimacije za proizvoljno $U(x)$. Gamow je približnu formulu za koeficijent prolaza izveo u radu iz 1928. godine u kome je dao objašnjenje α -raspada jezgra pomoću tunel efekta. Faktor uz eksponencijalnu funkciju koji je u formuli Gamow-a 1 zavisi od konkretnog oblika potencijalne barijere: u (egzaktnom) izrazu (2.124) koji smo računom dobili različit je od jedinice zbog štrmih zidova" potencijala (2.100).

2.7 Potencijalne jame

Sledeći fizički sistem koji ćemo modelovati pravougaonim potencijalom je vezujući: potencijalna jama. Razmatraćemo prvo slučaj kada je potencijalna jama beskonačno duboka,

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \in (0, a) \\ \infty, & x \notin (0, a) \end{cases}. \quad (2.126)$$



Slika 2.4: Beskonačno duboka jama.

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = E\psi \quad (2.127)$$

i ima rešenja

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = \alpha \sin kx + \beta \cos kx, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (2.128)$$

$\beta = A + B$, $\alpha = i(A - B)$. Uslov da su zidovi kutije neprobojni odnosno da potencijal van intervala $(0, a)$ ima beskonačno veliku vrednost znači da je $\psi(x) = 0$ za $x \notin (0, a)$. Iz neprekidnosti talasne funkcije u tačkama 0 i a onda imamo

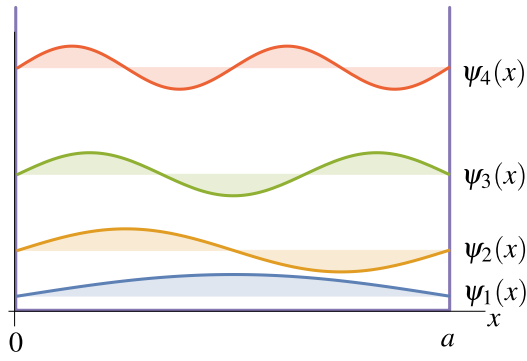
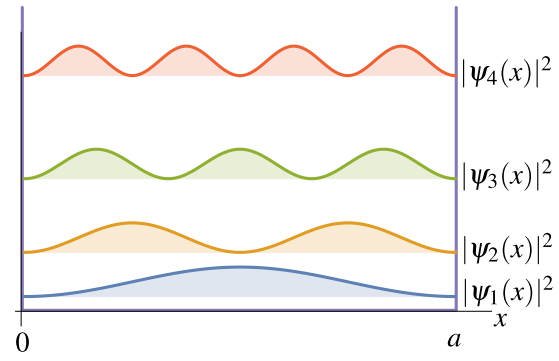
$$\psi(0) = 0, \quad \psi(a) = 0, \quad (2.129)$$

odnosno

$$\beta = 0, \quad ka = n\pi. \quad (2.130)$$

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

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad (2.131)$$

Slika 2.5: Četiri stanja najniže energije, $\psi_n(x)$, u beskonačno dubokoj potencijalnoj jami.Slika 2.6: Gustine verovatnoće $|\psi_n(x)|^2$ za stanja sa $n = 1, \dots, 4$.

kojima odgovaraju vrednosti energije

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2. \quad (2.132)$$

Vidimo da je energija kvantovana, odnosno da je njen spektar diskretan. Svakom broju n odgovara tačno jedna funkcija ψ_n pa su vrednosti energije nedegenerisane.

Proanaliziramo ukratko i kako izgledaju rešenja stacionarne Schrödinger-ove jednačine i spektar energije u slučaju dvodimenzione jame. Pretpostavimo da je potencijal

$$V(x, y) = U(x) + U(y) = \begin{cases} 0, & x \in (0, a) \wedge y \in (0, a) \\ \infty, & x \notin (0, a) \vee y \notin (0, a) \end{cases}, \quad (2.133)$$

$U(x)$ je (2.126). Ovo je dvodimenziona kvadratna kutija. Stacionarna Schrödinger-ova jednačina glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) + V\psi = E\psi, \quad (2.134)$$

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

$$\psi(x, y) = X(x)Y(y). \quad (2.135)$$

Za X i Y dobijamo jednačine

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{dx^2} + U(x)X = E_1 X, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Y}{dy^2} + U(y)Y = E_2 Y \quad (2.136)$$

gde je $E = E_1 + E_2$, pa možemo direktno da pišemo rešenja,

$$\psi_{n_1, n_2}(x, y) = \frac{\pi}{a} \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \sin \frac{n_2 \pi y}{a}. \quad (2.137)$$

Stacionarno rešenje (2.137) zavisi od dva kvantna broja n_1 i n_2 i ima energiju

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2). \quad (2.138)$$

Spektar energije je kao i malopre diskretan, ali većina tačaka u spektru je degenerisana. To nije slučaj sa osnovnim stanjem koje je jednoznačno,

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

Prvo pobuđeno stanje je dvostruko degenerisano jer postoje dve talasne funkcije koje imaju istu energiju $E_{1,2} = E_{2,1} = 5\hbar^2\pi^2/(2ma^2)$:

$$\psi_{1,2}(x, y) = \frac{\pi}{a} \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{2\pi y}{a}, \quad \psi_{2,1}(x, y) = \frac{\pi}{a} \sin \frac{2\pi x}{a} \sin \frac{\pi y}{a}. \quad (2.140)$$

Drugo pobuđeno stanje je opet nedegenerisano, ali na primer energija $50\hbar^2\pi^2/(2ma^2)$ je trostruko degenerisana jer joj odgovaraju tri kvantna stanja: $\psi_{1,7}$, $\psi_{7,1}$ i $\psi_{5,5}$ (što je posledica jednostavne činjenice da je $1 + 49 = 49 + 1 = 25 + 25$).

Na sličan način možemo da analiziramo degeneraciju energije izotropnog trodimenzionog harmonijskog oscilatora, čiji je hamiltonijan

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2 + z^2) = H_x + H_y + H_z. \quad (2.141)$$

I u ovom slučaju pri rešavanju Schrödinger-ove jednačine promenljive mogu da se razdvoje i rešenje se dobija u obliku

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(\xi, \eta, \zeta) = \psi_{n_1}(\xi) \psi_{n_2}(\eta) \psi_{n_3}(\zeta), \quad (2.142)$$

gde su ψ_{n_i} svojstvene funkcije jednodimenzionog oscilatora (2.24), a reskalirane promenljive su

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad \eta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} y, \quad \zeta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} z. \quad (2.143)$$

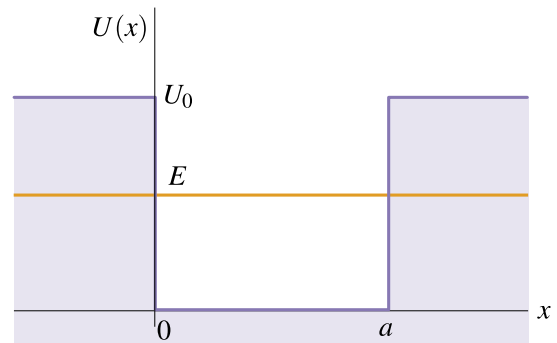
Vrednost energije stanja ψ_{n_1, n_2, n_3} je

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega. \quad (2.144)$$

Osnovno stanje koje ima energiju $3\hbar\omega/2$ je nedegenerisano, prvo pobuđeno stanje sa energijom $2\hbar\omega$ je trostruko degenerisano, drugo pobuđeno stanje sa energijom $5\hbar\omega/2$ je šestostruko degenerisano itd. Kasnije ćemo videti da je degeneracija najčešće povezana sa simetrijom sistema: izotropni harmonijski oscilator je invarijantan na rotacije. U slučaju neizotropnog oscilatora koji ima tri različite frekvence ω_1 , ω_2 i ω_3 koje su nesamerljive, sva svojstvena stanja energije su nedegenerisana.

Jednostavan model beskonačno duboke jame možemo da uporedimo sa nešto realističnijim modelom potencijalne jame konačne dubine. Potencijalna energija je u tom slučaju

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \in (0, a) \\ U_0, & x \notin (0, a) \end{cases}. \quad (2.145)$$



Slika 2.7: Konačna potencijalna jama.

Schrödinger-ovu jednačinu rešavamo na već uobičajeni način, zasebno u svakoj od tri oblasti, $x < 0$, $0 < x < a$, $x > a$, a onda dobijene funkcije glatko spajamo. Ako tražimo rešenja koja su unutar potencijalne jame, odnosno imaju energiju $E < U_0$, dobijamo funkciju oblika

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}, & x < 0, & \kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \\ C \sin kx + D \cos kx, & x \in (0, a), & k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ Ge^{\kappa x} + Fe^{-\kappa x}, & x > a, & \kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \end{cases}. \quad (2.146)$$

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

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

$$\begin{aligned} A = D, & & \kappa A = kC, \\ C \sin ka + D \cos ka = Fe^{-\kappa a}, & & k(C \cos ka - D \sin ka) = -\kappa Fe^{-\kappa a}. \end{aligned} \quad (2.147)$$

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

$$F = Ae^{\kappa a} \left(\frac{\kappa}{k} \sin ka + \cos ka \right) = -Ae^{\kappa a} \frac{k}{\kappa} \left(\frac{\kappa}{k} \cos ka - \sin ka \right) \quad (2.148)$$

koja moraju biti jednaka, iz čega sledi uslov konzistentnosti

$$\left(\frac{\kappa}{k} \right)^2 \tan ka + 2 \frac{\kappa}{k} - \tan ka = 0, \quad (2.149)$$

tj.

$$\tan \frac{ka}{2} = \frac{\kappa}{k}. \quad (2.150)$$

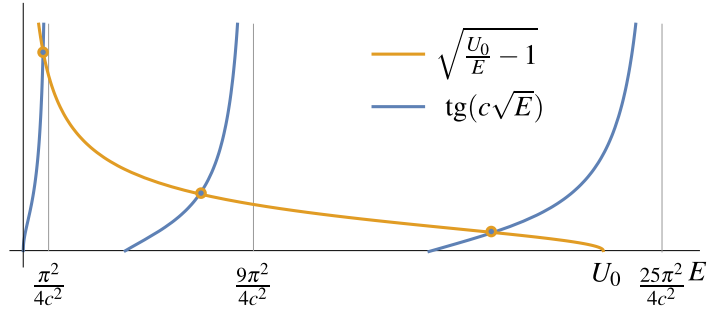
Pre nego što pređemo na rešavanje ovog uslova, da damo nekoliko opštih, delom tehničkih napomena. Sistem (2.147) je sistem četiri linearne homogene jednačine i ima netrivialno rešenje samo kada mu je determinanta jednaka nuli. Tada jednačine nisu nezavisne, nego se u rešenju tri konstante, npr. C , D , F , izražavaju preko četvrte, A , koja ostaje neodređena. Uslov da je determinanta nula daje vezu između k , κ i a : on je jednačina koja određuje vrednosti energije za koje imamo fizička rešenja, tj. njeno *kvantovanje*. Treba da zapazimo da uslov kvantovanja postoji samo kada tražimo vezana stanja tj. rešenja koja su unutar potencijalne jame: za $E > U_0$ rešenja u sve tri oblasti imaju oblik ravnih talasa, i u principu nema razloga da namećemo uslove $B = 0$, $G = 0$. Znači, za $E > U_0$ dobija se sistem od četiri jednačine sa šest (ili pet) nepoznatih koji može da se reši za proizvoljnu vrednost konstanti E i a , tj. E može biti bilo koji broj iz intervala (U_0, ∞) . Ovaj deo spektra energije je *kontinualan*.

Vratimo se na određivanje dozvoljenih vrednosti energije za $0 < E < U_0$. Imamo da je $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, $\kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}$, tako da jednačina (2.150) zapisana preko energije E glasi

$$\sqrt{\frac{U_0}{E}} - 1 = \tan(c\sqrt{E}), \quad (2.151)$$

gde je $c = \sqrt{ma^2/(2\hbar^2)}$. Jednačina je transcendentna i možemo da je rešavamo numerički ili grafički: pošto nas zanimaju samo kvalitativne osobine rešenja koristićemo grafički metod. On se sastoji u tome da se na grafiku nacrtaju dve funkcije, jedna jednaka levoj strani jednačine a druga jednaka desnoj, i gledaju njihovi preseki. U našem slučaju sa leve strane je funkcija koja ima ponašanje slično hiperboli, definisana je na intervalu $(0, U_0)$ a na kraju intervala postaje

Slika 2.8: Grafičko određivanje nivoa energije za česticu u konačnoj potencijalnoj jami.



nula. Na desnoj strani je tangens ali ne od E nego od \sqrt{E} , tako da funkcija nije periodična nego se rastojanja između vertikalnih asimptota povećavaju kao na slici 2.8. Lako možemo da dodemo do dva zaključka: prvo, uvek postoji bar jedan presek tj. jedno vezano stanje (i to je osnovno stanje) jer se hiperbola i tangens moraju preseći: jedno teži u ∞ a drugo u 0 i $E = 0$. Drugo, broj preseka je konačan jer je interval promene E ograničen. U principu, broj rešenja može tačno da se utvrdi i zavisi od odnosa dubine i širine potencijalne jame, U_0 i a .

Na osnovu gornje diskusije zaključujemo da je energija čestice unutar potencijalne jame kvantovana. Ukupni spektar energije sastoji se od konačnog broja tačaka između 0 i U_0 i kontinualnog intervala $(U_0, +\infty)$: osnovna razlika u odnosu na beskonačno duboku jamu je da je broj vezanih stanja konačan.

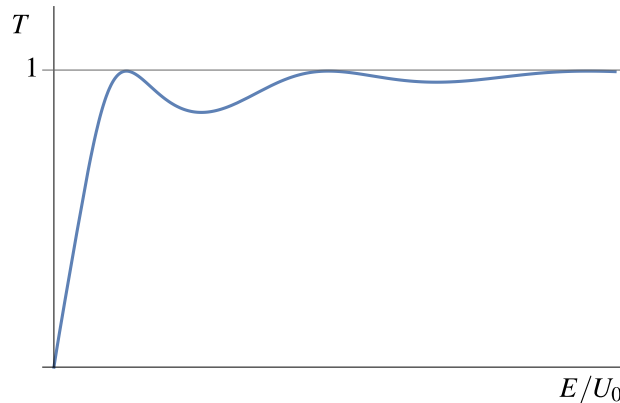
Pokazaćemo i eksplicitno da su sve vrednosti energije $E > U_0$ dozvoljene tj. da je ceo interval $(U_0, +\infty)$ u spektru energije, i odrediti koeficijent transmisije pri rasejanju slobodnih odnosno nevezanih stanja. Stacionarno rešenje kao i ranije uzimamo u obliku

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik'x} + Be^{-ik'x}, & x < 0, & k' = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}} \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx}, & x \in (0, a), & k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ Fe^{ik'x}, & x > a, & k' = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}} \end{cases}. \quad (2.152)$$

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

$$\begin{aligned} A + B &= C + D, & \frac{k'}{k}(A - B) &= C - D, \\ Ce^{ika} + De^{-ika} &= Fe^{ik'a}, & Ce^{ika} - De^{-ika} &= \frac{k'}{k}Fe^{ik'a}. \end{aligned} \quad (2.153)$$

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



Slika 2.9: Koeficijent transmisije, konačna potencijalna jama.

$$\frac{A}{Fe^{ik'a}} = \cos ka - i \frac{k^2 + k'^2}{2kk'} \sin ka, \quad (2.154)$$

pa je koeficijent transmisije

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{4k^2 k'^2}{4k^2 k'^2 \cos^2 ka + (k^2 + k'^2)^2 \sin^2 ka} = \frac{1}{\cos^2 ka + f^2 \sin^2 ka}, \quad (2.155)$$

gde je

$$f = \frac{k^2 + k'^2}{2kk'} = \left(1 + \frac{U_0}{2E} \right) \left(1 + \frac{U_0}{E} \right)^{-1/2}. \quad (2.156)$$

Ovaj rezultat može se dobiti i direktno iz (2.121) zamenom $k \rightarrow k'$, $\kappa \rightarrow ik$, tj. $\cosh \kappa a \rightarrow \cos ka$, $\sinh \kappa a \rightarrow i \sin ka$.

Zavisnost koeficijenta transmisije od energije data je na slici 2.9. On zavisi od faktora f koji teži jedinici za velike vrednosti energije, pa je tada barijera kao i u klasičnom slučaju prozračna, $T \rightarrow 1$. Maksimumi koeficijenta transmisije $T = 1$ dobijaju se i za vrednosti $\sin ka = 0$ koje odgovaraju diskretnim nivoima energije čestice u beskonačno dubokoj potencijalnoj jami, $ka = n\pi$, i nazivaju se *rezonance*. U poslednjoj glavi ćemo videti da, kada opisujemo interakciju dve čestice u sistemu njihovog centra mase, rezonance su dugoživeća odnosno "kvazidiskretnaštanja.

2.8 Osobine jednodimenzionih sistema

Da sumiramo osobine talasnih funkcija koje smo u primerima do sada dobili: od osobina koje navodimo samo su (5) i (6) specifične za jednodimenzione sisteme, dok ostale važe generalno.

(1) Već smo videli da kao fizički uslov uvek namećemo *neprekidnost talasne funkcije* odnosno gustine verovatnoće, bez obzira na to da li je potencijalna energija sistema neprekidna funkcija ili ne. Takođe, iz Schrödinger-ove jednačine smo izveli da je, za konačne skokove potencijala, neprekidan i prvi izvod talasne funkcije. To smo dobili integraleći jednačinu u malom intervalu $(x - \epsilon, x + \epsilon)$ oko proizvoljne tačke x :

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

Isti metod daje rezultat i kada potencijal ima beskonačan skok, npr. $U(x) = -U_0 \delta(x - a)$. Delta funkcija $\delta(x)$ je, kao što ćemo videti u sledećoj glavi, uopštena funkcija koja svuda ima vrednost 0, osim u tački $x = 0$ gde je beskonačna. Njena osnovna osobina je

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

Kada jednačinu (2.157) integralimo u okolini tačke a za potencijal $U(x) = -U_0 \delta(x - a)$, dobijamo da prvi izvod talasne funkcije ima skok čija je vrednost

$$\psi'(a+0) - \psi'(a-0) = -\frac{2mU_0}{\hbar^2} \psi(a). \quad (2.159)$$

(2) Druga matematička činjenica koja sledi iz zahteva kvadratne integrabilnosti je da *talasna funkcija u beskonačnosti teži nuli*. Zaista, pošto je gustina verovatnoće $\rho = |\psi|^2$ pozitivna, da bi integral bio konvergentan $|\psi|^2$ mora asimptotski da bude nula.

(3) Treća važna osobina koju smo već koristili je da su *vrednosti energije E stacionarnih stanja uvek veće od minimalne vrednosti potencijalne energije*. Ovo se lako vidi jer za rešenja stacionarne Schrödinger-ove jednačine važi

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* E \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + U(x) \psi \right) dx. \quad (2.160)$$

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

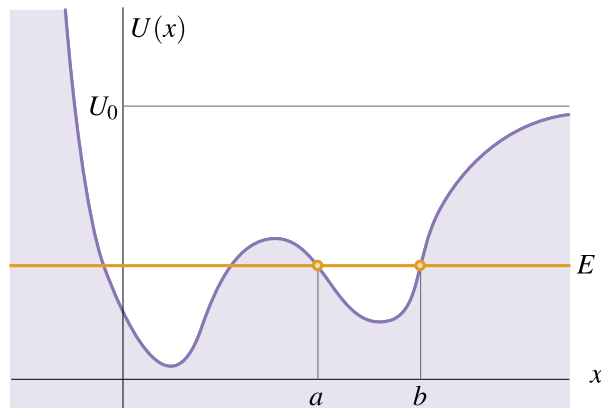
$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi'|^2 dx + \int_{-\infty}^{+\infty} U |\psi|^2 dx \geq U_{\min} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = U_{\min}. \quad (2.161)$$

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

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi'' dx = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\psi^* \psi' \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi'|^2 dx \right) \geq 0. \quad (2.162)$$

Kasnije ćemo videti da je navedena osobina u vezi sa opštijim (i dosta očiglednim) iskazom: očekivana vrednost fizičke opservable je između njene najmanje i najveće vrednosti.

(4) Prodiskutujmo još jednom šta su u kvantnoj mehanici vezana a šta slobodna stanja, uzimajući za potencijalnu energiju, kao primer, funkciju $U(x)$ sa slike 2.10, koja sa desne strane ima asimptotu U_0 a sa leve teži u beskonačnost. Energija čestice je E . U klasičnoj mehanici



Slika 2.10: Slobodna i vezana stanja.

oblast kretanja čestice ograničena je tačkama a i b u kojima se $U(x)$ preseca sa pravom E , $U(a) = U(b) = E$, jer su u ovim tačkama brzina čestice nula pa se ona zaustavlja i reflektuje od potencijalne barijere. U kvantnom sučaju, videli smo, postoji tunnel efekat. Tehnički, kada je potencijalna energija neprekidna funkcija, $\psi(a)$ i $\psi(b)$ po pravilu nisu nula pa postoji verovatnoća da čestica uđe "ispod" potencijalne barijere. Ipak kada je, kao na slici, vrednost energije manja od asimptotske vrednosti U_0 , ovo prodiranje u barijeru je malo jer verovatnoća prolaza eksponencijalno opada sa rastojanjem. To možemo da proverimo rešavajući Schrödinger-ovu jednačinu u udaljenoj oblasti $x \rightarrow +\infty$ u kojoj $U(x) \rightarrow U_0$. Asimptotski, jednačina je

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + U_0 \psi = E \psi, \quad (2.163)$$

i ima eksponencijalno opadajuće rešenje. To znači da se i rešenje početne jednačine u $x \rightarrow +\infty$ ponaša kao $e^{-\kappa x}$, $\kappa^2 = 2m(U_0 - E)/\hbar^2$. Zato je verovatnoća da se čestica nađe daleko od potencijalne jame nula pa je stanje *vezano* a kretanje čestice *lokalizovano*. Ali ako je $E > U_0$,

stanje je asimptotski ravan talas e^{ikx} , $k^2 = 2m(E - U_0)/\hbar^2$, i čestica može da ode beskonačno daleko tj. nije vezana potencijalom.

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

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2}(U(x) - E) = \frac{\psi_2''}{\psi_2}, \quad (2.164)$$

odnosno

$$\psi_1''(x)\psi_2(x) - \psi_2''(x)\psi_1(x) = 0. \quad (2.165)$$

Ako poslednju relaciju integralimo od $-\infty$ do x , koristeći da je $\psi_1(-\infty) = \psi_2(-\infty) = 0$ dobijamo

$$\psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_2'(x)\psi_1(x) = \text{const} = 0, \quad (2.166)$$

jer se vrednost konstante može izračunati u bilo kojoj tački pa i u $-\infty$. Iz poslednje jednakosti sledi

$$\log \psi_1 = \log \psi_2 + C \quad (2.167)$$

tj. funkcije ψ_1 i ψ_2 su proporcionalne, a to znači da predstavljaju isto fizičko stanje.

(6) Talasna funkcija kojom je opisano *n -to pobuđeno* vezano stanje energije ima n nula. Ova osobina, *oscilaciona teorema*, zapravo je teorema iz teorije diferencijalnih jednačina i nećemo je dokazivati: samo ćemo proveriti da važi u slučajevima koje smo razmatrali. Kod harmonijskog oscilatora *n -to pobuđeno stanje* proporcionalno je Hermité-ovom polinomu n -tog reda H_n , pa ima n realnih nula; kod beskonačno duboke potencijalne jame *n -to pobuđeno stanje* opisano je talasnom funkcijom $\psi_{n+1} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{(n+1)\pi x}{a}$, a ona na intervalu $(0, a)$ takođe ima n nula.

2.9 Kronig-Penney-jev model: energija elektrona u kristalu

Kronig-Penney-jev model je najjednostavniji model koji opisuje spektar energije elektrona u kristalu jer je definisan u jednoj dimenziji. Kristalna rešetka se sastoji od pozitivno naelektrisanih jona ili jezgara koja su (u aproksimaciji) fiksirana: njena osnovna osobina je da je periodična. Privlačni potencijal jona u čvorovima rešetke možemo da modelujemo na različite načine, na primer pomoću pravougaonog potencijala: još jednostavnije je da pretpostavimo da je u svakom čvoru rešetke potencijal oblika δ -funkcije. Ako su čvorovi na međusobnom rastojanju a , potencijalna energija je

$$U(x) = -U_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - na). \quad (2.168)$$

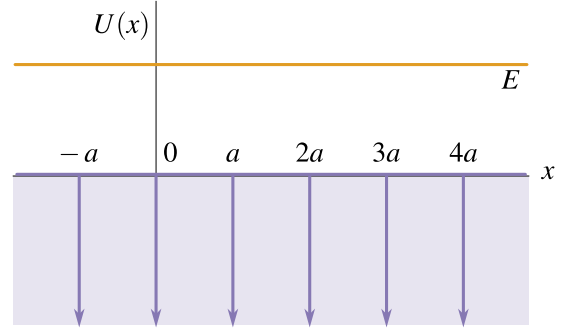
Ovakvim izborom zanemarujemo efekte krajeva.

Schrödinger-ovu jednačinu rešavamo unutar svakog od intervala $(na, (n+1)a)$, pa spajamo delove u jednu neprekidnu talasnu funkciju: unutar intervala potencijalna energija je nula. Razmotrimo elektrone koji nisu vezani, $E > 0$: delovi rešenja su linearne kombinacije ravnih talasa,

$$\psi(x) = \alpha_n e^{ikx} + \beta_n e^{-ikx}, \quad x \in (na, (n+1)a), \quad (2.169)$$

gde je $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Radi lakšeg formulisanja graničnih uslova u svakom od intervala možemo da uvedemo novu promenljivu

$$x_n = x - na, \quad (2.170)$$



Slika 2.11: Kronig-Penney potencijal.

pri čemu $x_n \in (0, a)$.⁵ U novim promenljivim imamo

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

gde su $A_n = e^{ikna} \alpha_n$, $B_n = e^{-ikna} \beta_n$.

Tačke diskontinuiteta potencijala su $x = na$, odnosno $x_n = 0, a$: pri tome je ista geometrijska tačka zadata vrednostima $x_n = a$ i $x_{n+1} = 0$. Uslov neprekidnosti talasne funkcije je

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

a uslov (2.159) za skok prvog izvoda

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

To su rekurentne relacije između koeficijenata A_n i B_n koje treba da rešimo. One se mogu prepisati u matricnoj formi

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

gde je

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

I ovde, kao i u drugim slučajevima, treba da proverimo da talasna funkcija u asimptotskim oblastima ne raste u beskonačnost. Odgovarajuće vrednosti gustine verovatnoće date su preko koeficijenata A_n i B_n za $n \rightarrow \pm\infty$. Pošto je

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

gornji uslov u stvari znači da matrica \mathcal{A} ne sme da menja normu vektora $\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}$, odnosno da je unitarna. Rešićemo njen svojstveni problem i nametnuti uslov da svojstvene vrednosti λ leže na jediničnom krugu u kompleksnoj ravni. Svojstvena jednačina $\det(\mathcal{A} - \lambda I) = 0$ svodi se na

$$\lambda^2 - 2b\lambda + 1 = 0, \quad (2.177)$$

⁵Uočimo da se translacija $x \rightarrow x - ma$ koja je simetrija ove kristalne rešetke svodi na smenu $x_n \rightarrow x_{m+n}$.

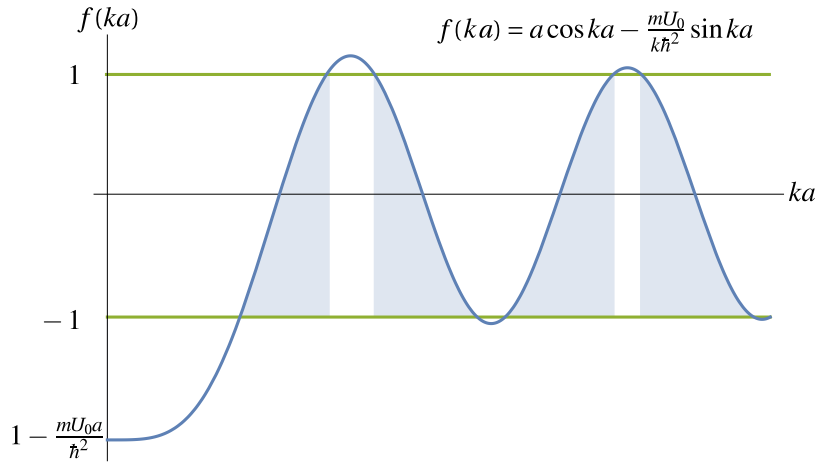
gde smo uveli

$$b = \cos ka - \frac{mU_0}{\hbar^2 k} \sin ka. \quad (2.178)$$

Lako se vidi da rešenja jednačine (2.177), $\lambda_{1,2} = b \pm \sqrt{b^2 - 1}$, imaju jediničnu apsolutnu vrednost samo ako je $|b| \leq 1$, odnosno

$$b = \cos \beta, \quad \lambda_{1,2} = e^{\pm i\beta}. \quad (2.179)$$

Uslov



Slika 2.12: Grafičko rešavanje uslova za energiju u Kronig-Penney-jevom modelu.

$$-1 \leq \cos ka - \frac{mU_0 a}{\hbar^2} \frac{\sin ka}{ka} \leq 1 \quad (2.180)$$

može da se analizira grafički (slika 2.12), i iz njega se dobijaju dozvoljene i zabranjene vrednosti za k odnosno za energiju E . Sa slike se vidi da se spektar energije sastoji od intervala, odnosno da ima *zonsku strukturu*, što osobina je karakteristična za sve periodične potencijale.

Proanaliziramo dobijeno rešenje malo detaljnije da bismo ga uporedili sa karakterističnim oblikom talasne funkcije koji se dobija iz Bloch-ove teoreme (i koji ćemo izvesti kasnije). Bloch-ova teorema kaže da, kada imamo sistem koji je, kao kristal, periodičan, odnosno ima diskretnu translacionu simetriju, njegova talasna funkcija može da se izabere u obliku

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \phi(\vec{r}), \quad (2.181)$$

gde je $\phi(\vec{r})$ periodična funkcija. U našem zapisu to znači da funkcija $\phi(x)$ zavisi na identičan način od x_n u svakom od intervala $(na, (n+1)a)$. Formu (2.181) u stvari imaju linearne kombinacije rešenja (2.171) koje su svojstveni vektori matrice \mathcal{A} . Označimo jedan od ovih vektora sa $\begin{pmatrix} \tilde{A}_0 \\ \tilde{B}_0 \end{pmatrix}$,

$$\mathcal{A}^{-1} \begin{pmatrix} \tilde{A}_0 \\ \tilde{B}_0 \end{pmatrix} = e^{i\beta} \begin{pmatrix} \tilde{A}_0 \\ \tilde{B}_0 \end{pmatrix}. \quad (2.182)$$

Iz osobina koje smo već dobili imamo da je

$$\left(1 - \frac{imU_0}{\hbar^2 k} - e^{i\beta+ika}\right) \tilde{A}_0 = \frac{imU_0}{\hbar^2 k} \tilde{B}_0, \quad (2.183)$$

kao i

$$\tilde{A}_n = e^{in\beta} \tilde{A}_0, \quad \tilde{B}_n = e^{in\beta} \tilde{B}_0. \quad (2.184)$$

Zbog toga se ovo rešenje u intervalu $(na, (n+1)a)$ može prepisati u obliku

$$\psi(x) = \tilde{A}_n e^{ikx_n} + \tilde{B}_n e^{-ikx_n} = e^{i\frac{\beta}{a}(na+x_n)} e^{-i\frac{\beta}{a}x_n} (\tilde{A}_0 e^{ikx_n} + \tilde{B}_0 e^{-ikx_n}). \quad (2.185)$$

Prvi faktor u rešenju odgovara ravnom talasu u Bloch-ovoj formi, pri čemu se kvaziimpuls ("kristalni impuls") q identifikuje kao

$$q = \frac{\beta}{a} = \frac{\arccos b}{a}. \quad (2.186)$$

Drugi deo rešenja zavisi samo od vrednosti p x_n , tj. periodičan je na diskretne translacije $x \rightarrow x + ma$. Funkcija $k = k(q)$ prikazana je na slici: njoj inverzna funkcija, $q = q(k)$ daje zavisnost energije $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ od kvaziimpulsa q , i na njoj se zonska struktura spektra energije vidi još preciznije. Jasno je da je na poslednjem dijagramu, zbog periodičnosti eksponencijalne funkcije, vrednosti qa dovoljno ograničiti na interval $(-\pi, \pi)$ odnosno na tzv. prvu Brillouin-ovu zonu.

SLIKA!!

2.10 WKB aproksimacija

Iz prethodnih primera jasno je da rešavanje Schrödinger-ove jednačine može biti komplikovano i za pravougaone potencijale, koji su dosta gruba aproksimacija realnih interakcija. Ipak, za primene je važno da makar približno i makar u nekom domenu parametara odredimo oblik talasne funkcije sistema koji razmatramo. U ovom poglavlju izložićemo jednu od često korišćenih metoda koja u stvari nije specifična za kvantnu mehaniku: WKB aproksimaciju, koju su u radovima iz 1926. godine izveli Wentzel, Kramers i Brillouin. Ostalim približnim metodama posvećena je poslednja glava.

WKB aproksimacija daje, između ostalog, i jednu od veza kvantne mehanike sa klasičnom: *semiklasični limes*. Klasični limes kvantne mehanike može se, formalno, definisati uslovom $\hbar \rightarrow 0$,⁶ ili tačnije, uslovom da su vrednosti dejstva koje karakterišu zadati problem mnogo veće od Planck-ove konstante: semiklasična aproksimacija je onda aproksimacija do linearnog člana u razvoju talasne funkcije (i Schrödinger-ove jednačine) po \hbar . U semiklasičnom režimu vrednosti energije su velike: za visoko pobuđena vezana stanja, po oscilacionoj teoremi, to znači da talasna funkcija ima veliki broj nula. Sledi da na semiklasična stanja možemo da primenimo aproksimaciju visokih frekvenci, odnosno da se u razlaganju talasne funkcije na amplitudu i fazu, faza menja mnogo brže od amplitude. Slična je veza između talasne i geometrijske optike: geometrijska optika je limes talasne optike (odnosno elektrodinamike) kada su talasne dužine talasa zanemarljivo male⁷. Pokazaćemo u nastavku da su u našem slučaju razvoj po \hbar i aproksimacija visokih frekvenci i formalno ekvivalentne.

Posmatramo stacionarnu Schrödinger-ovu jednačinu u jednoj dimenziji

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + (E - U(x))\psi(x) = 0, \quad (2.187)$$

koju uvođenjem "klasičnog impulsa" $p(x)$,

$$p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}, \quad (2.188)$$

⁶Izvinjenje Milovanu Vasiliću koji je više puta ponovio da je ovaj iskaz besmislen pošto je \hbar konstanta.

⁷*Principles of Optics*, M. Born, E. Wolf, Pergamon Press, 1964. Aproksimacija visokih frekvenci koristi se i u drugim oblastima fizike kod izvođenja disperzionih relacija, npr. za gravitacione talase.

možemo da prepíšemo u obliku

$$\hbar^2 \psi'' + p^2(x) \psi = 0. \quad (2.189)$$

Za slobodnu česticu je $p(x) = \text{const}$, a rešenja su ravni talasi

$$\psi(x) = e^{\pm \frac{i}{\hbar} p x}. \quad (2.190)$$

I u opštem slučaju možemo da uvedemo, po analogiji,

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} S(x)}, \quad (2.191)$$

$S(x)$ onda zadovoljava

$$i\hbar S'' - S'^2 + 2m(E - U) = 0. \quad (2.192)$$

Ako pretpostavimo da razvoj funkcije $S(x)$ u red po \hbar ,

$$S(x) = S_0(x) - i\hbar S_1(x) + (-i\hbar)^2 S_2(x) + \dots, \quad (2.193)$$

ima smisla tj. da je za malo \hbar konvergentan, zamenom i izjednačavanjem članova uz iste stepene iz (2.192) dobijamo sistem jednačina

$$(S_0')^2 - 2m(E - U) = 0 \quad (2.194)$$

$$S_0'' + 2S_0' S_1' = 0 \quad (2.195)$$

$$S_1'' + (S_1')^2 + 2S_0' S_2' = 0 \quad (2.196)$$

⋮

Dati sistem se rešava rekurentno, red po red. U nultom redu za funkciju $S_0(x)$, uz fiksiranje graničnog uslova, dobijamo

$$S_0 = \pm \int_{-\infty}^x \sqrt{2m(E - U(x))} dx = \pm \int_{-\infty}^x p(x) dx. \quad (2.197)$$

Koristeći dobijeni izraz za $S_0(x)$ možemo da rešimo (2.195) i odredimo $S_1(x)$:

$$S_1 = -\frac{1}{2} \log S_0' + \text{const} = -\frac{1}{2} \log p(x). \quad (2.198)$$

Druga korekcija, $S_2(x)$, može se dobiti iz (2.196) zamenom poznatih $S_0(x)$ i $S_1(x)$, i tako dalje. U prvom redu po \hbar dobijena rešenja za talasnu funkciju su

$$\psi_{1,2}(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx}, \quad (2.199)$$

opšte rešenje je oblika

$$\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} + \frac{c_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx}. \quad (2.200)$$

Kada je ukupna energija čestice veća od potencijalne energije, $E > U(x)$, klasični impuls $p(x)$ je realan pa su faza i amplituda talasne funkcije iz (2.51) date sa

$$S_0(x) = \phi(x), \quad e^{S_1(x)} = \sqrt{\rho(x)}. \quad (2.201)$$

Označimo sa δx karakterističnu dužinu promene faze, a sa Δx karakterističnu dužinu promene amplitude talasne funkcije. Karakteristična dužina na kojoj se eksponencijalna funkcija menja može da se odredi (definiše) kao

$$\Delta x \sim \left| \frac{A}{A'} \right| \sim \left| \frac{e^{S_1}}{(e^{S_1})'} \right| = \frac{1}{|S_1'|}, \quad \delta x \sim \left| \frac{e^{iS_0/\hbar}}{(e^{iS_0/\hbar})'} \right| = \frac{\hbar}{|S_0'|}. \quad (2.202)$$

Odnos ovih dužina je

$$\frac{\delta x}{\Delta x} \sim \hbar \frac{|S_1'|}{|S_0'|}, \quad (2.203)$$

iz čega se vidi da su limes $\hbar \rightarrow 0$ i aproksimacija visokih frekvenci $\delta x/\Delta x \ll 1$ ekvivalentni.

Zamena slična smeni (2.191) može da se uvede i za vremenski zavisnu talasnu funkciju. Ako označimo

$$\Psi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}(x, t)} \quad (2.204)$$

i uvedemo ovu smenu u nestacionarnu Schrödinger-ovu jednačinu, dobijamo

$$-\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} = \frac{1}{2m} (\nabla \mathcal{S})^2 - \frac{i\hbar}{2m} \Delta \mathcal{S} + U. \quad (2.205)$$

Za $\hbar = 0$ ovo je Hamilton-Jacobi-jeva jednačina, što i daje vezu odnosno klasični limes kvantne mehanike. Rešenje Hamilton-Jacobi-jeve jednačine je

$$\mathcal{S} = -Et + S_0, \quad (2.206)$$

gde je S_0 klasično dejstvo sistema. Za $\hbar \neq 0$ rešenje (2.205) je oblika

$$\mathcal{S}(x, t) = -Et + S(x), \quad (2.207)$$

a $S(x)$ je, kao što smo videli, logaritam talasne funkcije, (2.191).

Rešenje (2.200) važi nezavisno od toga da li je energija čestice veća ili manja od vrednosti potencijala, odnosno da li je $p(x)$ realno ili imaginarno. Uobičajeno je ipak da se rešenje piše u obliku (2.200) u oblastima u kojima je $E > U(x)$, a da se u oblasti $E < U(x)$ izrazi kao

$$\psi(x) = \frac{c_1'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^x |p(x)| dx} + \frac{c_2'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^x |p(x)| dx}. \quad (2.208)$$

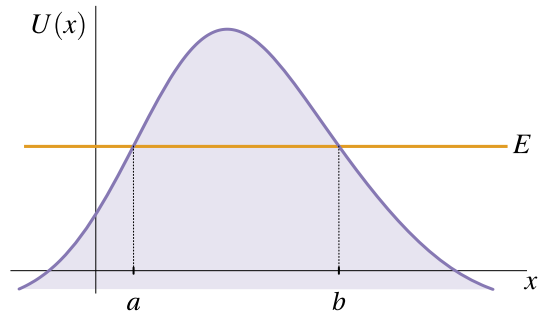
Netrivijalno pitanje je kako da se rešenja (2.200) i (2.208) glatko spoje: problem je u tome što u okolini tačaka x_i u kojima se prelazi iz jedne u drugu oblast, $E = U(x_i)$, ne važi WKB aproksimacija. Ovo se lako proverava: uslov pod kojim smo dobili WKB rešenja je

$$\frac{\hbar S''}{S'^2} \ll 1. \quad (2.209)$$

Kada izračunamo levu stranu ove nejednakosti za S_0 dato izrazom (2.197), dobijamo

$$\frac{\hbar S_0''}{S_0'^2} = \frac{\hbar m U'}{p^3}, \quad (2.210)$$

što očigledno nije $\ll 1$ u okolini tačaka u kojima je $p(x_i) = 0$; uostalom, u ovim tačkama i aproksimativni izrazi za talasnu funkciju (2.200), (2.208) divergiraju. Pažljivom analizom uslova spajanja dobija se da se pri prolasku kroz barijeru u tačkama preseka E sa $U(x)$ faza talasne funkcije menja za $\pi/4$.⁸



Slika 2.13: Prolaz kroz barijeru u WKB aproksimaciji.

Rekli smo da se WKB aproksimacija može iskoristiti za ocenu koeficijenta transmisije pri prolasku kroz potencijalnu barijeru proizvoljnog oblika: za tu, približnu, ocenu ne moramo da znamo tačan oblik talasne funkcije u celom prostoru već možemo da uporedimo njene vrednosti u okolini barijere. Pretpostavimo da je potencijalna energija oblika kao na slici 2.13, a prava $E = \text{const}$ seče potencijal u tačkama a i b , $E = U(a) = U(b)$. Fluks verovatnoće upadnog talasa

$$\psi(x) = \sqrt{\rho(x)} e^{-i\phi(x)} \quad (2.211)$$

u oblasti sa leve strane od a dat je formulom (2.52),

$$j(x) = \frac{\rho(x)}{m} \frac{d\phi(x)}{dx}, \quad (2.212)$$

pa za rešenje (2.201) dobijamo

$$j(x) = \frac{\rho(x)}{m} \sqrt{2m(E - U(x))}. \quad (2.213)$$

Slično važi i za transmitovani talas u oblasti $x > b$. Iako su u tačkama a i b talasna funkcija divergira, koeficijent transmisije

$$T = \frac{j(b)}{j(a)} = \frac{\rho(b)}{\rho(a)} \quad (2.214)$$

je konačan i može se, zbog neprekidnosti talasne funkcije, izračunati poređenjem njenih vrednosti u tačkama unutar (a, b) . Ispod barijere talasna funkcija je

$$\psi(x) = \frac{c}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^x |p(x)| dx}. \quad (2.215)$$

Za koeficijent transmisije se dobija

$$T = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx} \quad (2.216)$$

odnosno formula Gamow-a, (2.125).

⁸Standardne reference za WKB aproksimaciju su L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, Elsevier, 1977. i S. Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, 2013. Za detaljniju diskusiju pogledati i rad A. Garg-a, Am. J. Phys. **68** (2000) 430.

2.11 Dodatak

Frobenius-ov metod

Jednačine sa konstantnim koeficijentima su jedini tip diferencijalnih jednačina koje se mogu rešiti u opštem slučaju preko elementarnih funkcija. Kod ostalih linearnih jednačina rešenja obično ne mogu da se prikažu u zatvorenoj formi nego u obliku beskonačnog reda ili kontinualne frakcije ili integrala, i najčešće ta rešenja definišu nove transcendentne funkcije.

Iako za linearne diferencijalne jednačine u opštem slučaju ne postoji sistematski metod za rešavanje, postoje teoreme o egzistenciji i jednoznačnosti rešenja. Posmatrajmo jednačinu

$$p_0(x) \frac{d^{(n)}y}{dx^n} + p_1(x) \frac{d^{(n-1)}y}{dx^{n-1}} + \dots + p_n(x) y = 0. \quad (2.217)$$

Ako su u intervalu $x \in (a, b)$ sve funkcije p_0, p_1, \dots, p_n analitičke i nemaju nule (odnosno, ako su sve tačke intervala *regularne*), onda u tom intervalu za zadate početne uslove postoji jednoznačno i neprekidno rešenje $y(x)$ jednačine (2.217): to rešenje se može dobiti razvojem u Taylor-ov red oko proizvoljne regularne tačke. U kvantnoj mehanici diferencijalne jednačine su obično drugog reda,

$$p_0(x) y'' + p_1(x) y' + p_2(x) y = 0, \quad (2.218)$$

odnosno

$$y'' + p(x) y' + q(x) y = 0, \quad (2.219)$$

gde je $p(x) = p_1(x)/p_0(x)$, $q(x) = p_2(x)/p_0(x)$. *Singularne tačke* $\{x_0, \dots\}$ ove jednačine su nule funkcije p_0 , $p_0(x_0) = 0$. Pošto u intervalima između singularnih tačaka, po gornjoj teoremi, rešenje jednačine postoji i može da se izrazi razvojem u Taylor-ov red, važno je da ispitamo jednačinu u singularnim tačkama.

Tačka x_0 je *regularna singularna* tačka jednačine (2.219) ako u $x = x_0$ funkcija $p(x)$ ima pol prvog reda a $q(x)$ pol drugog reda; u suprotnom, x_0 je *iregularna singularna* tačka. U okolini regularne singularne tačke rešenja se mogu dobiti razvojem u Taylor-ov red oko x_0 , a red ima nenulti radijus konvergencije: to je suština Frobenius-ove teoreme. Rešenje se dobija tako što se prvo odrede *eksponenti* jednačine u singularnim tačkama (tj. vodeći članovi u rešenju), brojevi $\alpha_{1,2}$ koji zadovoljavaju

$$\alpha(\alpha - 1) + P_0\alpha + Q_0 = 0 \quad (2.220)$$

gde su

$$P_0 = (x - x_0)p(x)|_{x=x_0}, \quad Q_0 = (x - x_0)^2 q(x)|_{x=x_0}. \quad (2.221)$$

U zavisnosti od osobina eksponenata, linearno nezavisna rešenja $y_1(x)$ i $y_2(x)$ jednačine (2.219) data su sa

(1) $\alpha_1 - \alpha_2 \notin \mathbb{Z}$:

$$y_1 = (x - x_0)^{\alpha_1} \sum_{k=0}^{\infty} a_k (x - x_0)^k, \quad y_2 = (x - x_0)^{\alpha_2} \sum_{k=0}^{\infty} b_k (x - x_0)^k. \quad (2.222)$$

(2) $\alpha_1 = \alpha_2$:

$$y_1 = (x - x_0)^{\alpha_1} \sum_{k=0}^{\infty} a_k (x - x_0)^k, \quad y_2 = y_1(x) \log(x - x_0) + (x - x_0)^{\alpha_1} \sum_{k=1}^{\infty} b_k (x - x_0)^k. \quad (2.223)$$

(3) $\alpha_1 - \alpha_2 \in \mathbb{Z}$:

$$y_1 = (x - x_0)^{\alpha_1} \sum_{k=0}^{\infty} a_k (x - x_0)^k, \quad y_2 = C y_1(x) \log(x - x_0) + (x - x_0)^{\alpha_2} \sum_{k=1}^{\infty} b_k (x - x_0)^k, \quad (2.224)$$

a konstanta C može biti i 0. U sva tri slučaja rekurentna relacija između koeficijenata a_k tj. b_k dobija se zamenom Taylor-ovog razvoja u početnu diferencijalnu jednačinu.

Važan primer jednačine sa regularnim singularnim tačkama je *hipergeometrijska jednačina*

$$x(1-x)y'' + (\gamma - (\alpha + \beta + 1)x)y' - \alpha\beta y = 0. \quad (2.225)$$

Ona ima tri regularne singularne tačke, $x = 0$ (u kojoj su eksponenti 0 i $1 - \gamma$), $x = 1$ (eksponenti su 0 i $\gamma - \alpha - \beta$) i $x = \infty$ (eksponenti su α i β). Rešenje hipergeometrijske jednačine naziva se hipergeometrijska funkcija i označava sa $F(\alpha, \beta; \gamma; x)$. Svaka diferencijalna jednačina drugog reda sa tri regularne singularne tačke a, b, c može se svesti na hipergeometrijsku jednačinu smenom nezavisno promenljive oblika

$$\xi = \frac{Ax + B}{Cx + D}; \quad (2.226)$$

ova smena prevodi tačke a, b, c u $0, 1, \infty$. Sa druge strane, smenom zavisno promenljive

$$u = \left(\frac{x-a}{x-b}\right)^k \left(\frac{x-c}{x-b}\right)^l y, \quad (2.227)$$

eksponenti jednačine u tačkama a, b, c mogu da se promene: pri tome razlika eksponenata u svakoj tački ostaje ista.

Hermité-ovi polinomi

HERMITÉ-OVI POLINOMI su rešenja Hermité-ove jednačine

$$y'' - 2xy' + 2ny = 0 \quad (2.228)$$

i mogu se izraziti preko elementarnih funkcija kao

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}). \quad (2.229)$$

FUNKCIJA GENERATRISA:

$$e^{2xt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(x). \quad (2.230)$$

Pošto je n -tog reda, polinom $H_n(x)$ ima n nula koje su sve proste i realne; polinomi su parni ili neparni

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x). \quad (2.231)$$

SPECIJALNE VREDNOSTI:

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1, & H_2(x) &= 4x^2 - 2, \\ H_1(x) &= 2x, & H_3(x) &= 8x^3 - 12x. \end{aligned} \quad (2.232)$$

REKURENTNE RELACIJE:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x), \quad (2.233)$$

$$\frac{dH_n(x)}{dx} = 2nH_{n-1}(x), \quad (2.234)$$

RELACIJE ORTOGONALNOSTI:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) dx = \delta_{mn} 2^n \sqrt{\pi} n!. \quad (2.235)$$

ADICIONE FORMULE:

$$2^{n/2} H_n(x+y) = \sum_k^n H_k(\sqrt{2}x) H_{n-k}(\sqrt{2}y). \quad (2.236)$$

POSEBNE FORMULE:

$$\sum_n \frac{t^n}{2^n n!} H_n(x) H_n(y) = \frac{1}{\sqrt{1-t^2}} \exp\left(\frac{2xyt - (x^2+y^2)t^2}{1-t^2}\right) \quad (2.237)$$

$$\sum_n \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n!} e^{-\frac{x^2+y^2}{2}} H_n(x) H_n(y) = \delta(x-y). \quad (2.238)$$

SVOJSTVENE FUNKCIJE HARMONIJSKOG OSCILATORA I ORTONORMIRANOST:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n \sqrt{\pi} n!}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x), \quad (2.239)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}. \quad (2.240)$$

Fourier-ova transformacija

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

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k) e^{ikx} dk \quad (2.241)$$

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

$$c(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx \quad (2.242)$$

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

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} dk, \quad (2.243)$$

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx. \quad (2.244)$$

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

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar} px} dp, \quad (2.245)$$

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px} dx. \quad (2.246)$$

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

Za Fourier-ove koeficijente važi

$$(\widetilde{\psi'})'(k) = ik\widetilde{\psi}(k), \quad (\widetilde{\psi''})'(k) = -k^2\widetilde{\psi}(k), \quad (2.247)$$

kao i

$$(\widetilde{\psi\chi})(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \widetilde{\psi}(k-l)\widetilde{\chi}(l)dl. \quad (2.248)$$

Poisson-ovi integrali i gama funkcija

POISSON-OV INTEGRAL:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-px^2-qx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{p}} e^{\frac{q^2}{4p}}, \quad \operatorname{Re} p > 0 \quad (2.249)$$

Iz ovog integrala diferenciranjem po parametrima mogu se dobiti i drugi Poisson-ovi integrali, npr.

$$\int x e^{-px^2-qx} dx = -\frac{\partial}{\partial q} \int e^{-px^2-qx} dx = -\frac{q}{2p} \sqrt{\frac{\pi}{p}} e^{\frac{q^2}{4p}}, \quad (2.250)$$

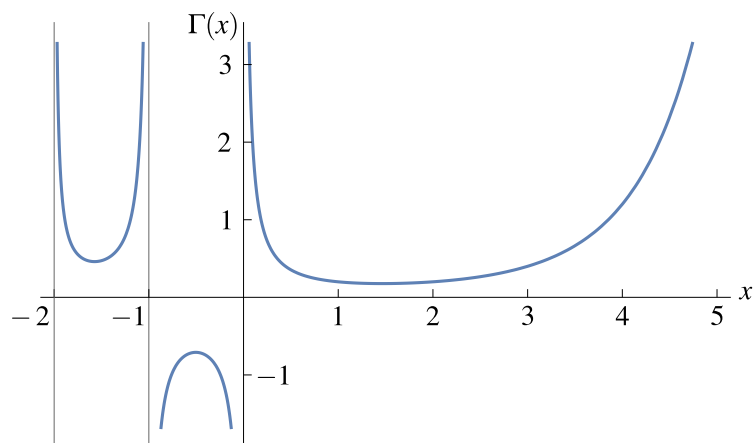
$$\int x^2 e^{-px^2-qx} dx = -\frac{\partial}{\partial p} \int e^{-px^2-qx} dx = \frac{q^2 + 2p}{4p^2} \sqrt{\frac{\pi}{p}} e^{\frac{q^2}{4p}}, \quad (2.251)$$

itd. Vrednosti ovih integrala mogu se izračunati i pomoću gama-funkcije, odnosno formula (2.253) i (2.255).

GAMA-FUNKCIJA je specijalna funkcija koja može da se se definiše kao rešenje jednačine

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z), \quad \Gamma(1) = 1. \quad (2.252)$$

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



Slika 2.14: Gama funkcija realnog argumenta.

INTEGRALNA REPREZENTACIJA:

$$\Gamma(z) = \int_0^{+\infty} e^{-t} t^{z-1} dt, \quad \arg t = 0, \operatorname{Re} z > 0. \quad (2.253)$$

POSEBNE VREDNOSTI:

$$\Gamma(n) = (n-1)! \quad (2.254)$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} \frac{(2n-1)!!}{2^n}. \quad (2.255)$$

ASIMPTOTIKA:

$$|z| \rightarrow \infty: \quad \Gamma(z) \approx \left(z - \frac{1}{2}\right) \log z - z + \frac{\log 2\pi}{2} + \sum_1^{\infty} \frac{B_{2n}}{2n(2n-1)} \frac{1}{z^{2n-1}} \quad (2.256)$$

za $|\arg z| < \pi$, gde su B_{2n} Bernoulli-jevi brojevi.

2.12 Zadaci

2.1 Skicirati gustine verovatnoće za prva četiri stanja harmonijskog oscilatora.

2.2 Normirati talasne funkcije harmonijskog oscilatora $\psi_n(x)$.

2.3 Hermite-ovi polinomi mogu se izračunati na sledeće načine

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} = e^{\frac{x^2}{2}} \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{x^2}{2}} = \left(2x - \frac{d}{dx}\right)^n 1,$$

ili pomoću funkcije generatriše

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

Eksplicitno odrediti prva tri Hermite-ova polinoma koristeći gornje formule.

2.4 Dokazati rekurentne relacije koje zadovoljavaju Hermite-ovi polinomi:

$$\frac{dH_n(x)}{dx} = 2nH_{n-1}(x), \quad H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x).$$

2.5 Za Hermite-ove polinome:

a) pokazati da važi

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0;$$

b) polazeći od prethodne jednakosti dokazati relacije ortogonalnosti Hermite-ovih polinoma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm}$$

2.6 Pokazati da je

$$\text{a) } \psi_n'(\xi) = \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(\xi) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(\xi),$$

$$\text{b) } \xi \psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(\xi) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(\xi).$$

Ovde je $\psi_n(\xi)$ talasna funkcija n -tog svojstvenog stanja harmonijskog oscilatora.

2.7 Naći očekivane vrednosti kinetičke $\langle T \rangle$ i potencijalne energije $\langle U \rangle$ harmonijskog oscilatora u stanju $\psi_n(x)$.

2.8 Čestica mase m nalazi se u potencijalu harmonijskog oscilatora $U(x) = m\omega^2 x^2/2$. U početnom trenutku čestica je u stanju

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + i\psi_2),$$

koje je linearna kombinacija prvog i drugog pobuđenog stanja oscilatora.

a) Odrediti u proizvoljnom trenutku funkciju stanja $\psi(x, t)$ i gustinu verovatnoće $|\psi(x, t)|^2$.

b) Naći vremensku zavisnost očekivane vrednosti koordinate $\langle x \rangle$ u stanju $\psi(x, t)$.

2.9 Koristeći tri osnovne veličine koje opisuju kvantnomehanički oscilator m , ω i \hbar , dimenzionom analizom naći karakterističnu dužinu x_0 , impuls p_0 i energiju E_0 oscilatora.

2.10 Čestica mase m nalazi se u potencijalu

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, & x > 0 \end{cases}.$$

Ovo je fizički model oprugu koja može da se isteže ali ne može da se sabija. Odrediti spektar energije i odgovarajuća stanja ovog sistema.

2.11 Pokazati da je gustina verovatnoće harmonijskog oscilatora u proizvoljnom stanju periodična funkcija vremena i da ima istu vrednost nakon jednog perioda klasičnog oscilatora $T = 2\pi/\omega$.

2.12 Čestica mase m nalazi se u potencijalu harmonijskog oscilatora frekvencije ω . U početnom trenutku čestica je u stanju

$$\Psi(x, t = 0) = A \left(1 + x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}.$$

- Odrediti dalju evoluciju stanja.
- Posle kog vremena T se sistem vrati u početno stanje?
- Naći najkraće vreme posle kog se sistem nađe u stanju

$$\Psi(x, \tau) = B \left(1 - x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2},$$

gde je B neka konstanta.

2.13 Sistem je opisan hamiltonijanom

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \alpha m\omega^2 y^2,$$

gde je α realan parametar. Odrediti degeneraciju energetske nivoa za $\alpha = 1$ i $\alpha = 2$.

2.14 Na česticu mase m deluju dva jednaka oscilatora čiji su ravnotežni položaji u $x = a$ i $x = -a$. Potencijalna energija je

$$U = \frac{1}{2} m\omega^2 (x - a)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 (x + a)^2.$$

Odrediti energiju i talasnu funkciju osnovnog stanja ove čestice, a potom izračunati očekivanu vrednost koordinate $\langle x \rangle$ u osnovnom stanju.

2.15 Ako su $\psi_1(\vec{r})$ i $\psi_2(\vec{r})$ rešenja vremenski nezavisne Schrödinger-ove jednačine kojima odgovara ista energija E . Pokazati da je i njihova linearna kombinacija takođe rešenje Schrödinger-ove jednačine.

2.16 Pri rešavanju radijalnog dela Schrödinger-ove jednačine za harmonijski oscilator mase m i frekvencije ω u tri dimenzije dobija se diferencijalna jednačina

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) u(r) = 0.$$

Ovde je $u(r)$ nepoznata funkcija definisana za $r > 0$ a l je nenegativan ceo broja. Funkcija $u(r)$ zadovoljava granične uslove

$$\lim_{r \rightarrow 0} u(r) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} u(r) = 0.$$

Frobenius-ovim metodom rešiti ovu diferencijalnu jednačinu, odnosno naći vrednosti energije E za koje postoji rešenje koje zadovoljava ove granične uslove.

2.17 Jedno od stacionarnih stanja čestice mase m dato je talasnom funkcijom

$$\Psi(x, t) = C \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2} - i\frac{\hbar}{2mb^2}t\right),$$

gde su C i b konstante. Naći potencijalnu energiju ove čestice.

2.18 Stanje čestice je opisano normiranom talasnom funkcijom $\psi(x) = f(x)e^{ik_0x}$, gde je $f(x)$ realna funkcija realne promenljive i k_0 konstanta.

a) Izračunati

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)^2 dx.$$

b) Odrediti očekivanu vrednost impulsa čestice u ovom stanju.

2.19 Naći dimenziju talasne funkcije čestice koja se kreće u jednoj, dve i tri prostorne dimezije.

2.20 U (2.44) definisane su gustina verovatnoće ρ i struja verovatnoće \vec{j} . Pokazati da se struja verovatnoće može napisati kao:

$$\vec{j} = -\frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^* \nabla \Psi).$$

2.21 Odrediti struju verovatnoće ako je stanje čestice opisano talasnom funkcijom:

a) $\Psi(x, t) = Ae^{ikx} e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t},$

b) $\Psi(x, t) = (Ae^{ikx} + Be^{-ikx})e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t},$

c) $\Psi(x, t) = A \sin(kx) e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t}.$

2.22 Polazeći od Schrödinger-ove jednačine, pokazati da očekivane vrednosti impulsa i sile zadovoljavaju drugi Newton-ov zakon.

2.23 Pokazati da se rešenje vremenski nezavisne Schrödinger-ove jednačine uvek može izabrati tako da bude realna funkcija.

2.24 Talasna funkcija čestice mase m može se napisati u formi $\psi(x) = \sqrt{\rho(x)} e^{i\phi(x)}$ gde su amplituda $\sqrt{\rho(x)}$ i faza $\phi(x)$ realne funkcije. Izračunati fluks verovatnoće.

2.25 Razmotrimo verovatnoću nalaženja jednodimenzionalne čestice u konačnom intervalu (a, b) u trenutku t :

$$P_{(a,b)}(t) = \int_a^b dx |\Psi(x, t)|^2.$$

Pokazati da se brzina promene ove veličine može napisati u obliku

$$\frac{dP_{(a,b)}}{dt} = j(a, t) - j(b, t),$$

gde je $j(x, t)$ fluks verovatnoće.

2.26 Ako je

$$\Psi(x, t) = \int_0^{\infty} dk c(k) e^{ik(x-v_g t)},$$

pokazati da je

$$\Psi(x, t) = \Psi(x - v_g t, 0).$$

2.27 Naći faznu v_f i grupnu v_g brzinu relativističke kvantne čestice mase mirovanja m . Pokazati da je $v_f v_g = c^2$.

2.28 Pokazati da su funkcije e^{ikx} i e^{-ikx} linearno nezavisne. Razmotriti linearnu nezavisnost ako se ovim dvema funkcijama doda treća funkcija $\sin(kx)$.

2.29 Odrediti proizvod neodređenosti koordinate i impulsa u proizvoljnom trenutku ako je talasna funkcija čestice

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{a}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}}} \exp\left(-\frac{a^2 k_0^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{(x - i a^2 k_0)^2}{2a^2 \left(1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}\right)}\right).$$

2.30 Čestica je u polju harmonijskog oscilatora i nalazi se u prvom pobuđenom stanju tako da je njena talasna funkcija

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4} \sqrt{2} x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right).$$

U jednom trenutku ona postane slobodna. Odrediti njenu dalju evoluciju.

2.31 Čestica mase m i energije $E > U_0$ nailazi na barijeru

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

Naći koeficijent refleksije ako se čestica kreće:

- a) s leva na desno;
- b) s desna na levo.

2.32 Razmotrimo prolaz čestice mase m i energije E iznad barijere visine $U_0 < E$ i širine a

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

Naći koeficijent prolaza T i odrediti za koje energije je transmisija potpuna, $T = 1$.

2.33 Naći koeficijent transmisije za česticu mase m koja ima energiju E i nailazi s leva na barijeru

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_1, & 0 < x < L \\ U_2, & x > L \end{cases}.$$

Pri tome je $U_1 > E > U_2 > 0$. Napisati granične uslove i odrediti T pomoću progama *Mathematica*TM.

2.34 Pokazati da ne postoje rešenja vremenski nezavisne Schrödinger-ove jednačine za česticu čija je potencijalna energija

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

ako je energija $E \leq 0$.

2.35 Polazeći od talasnih funkcija koje predstavljaju rešenje vremenski nezavisne Schrödinger-ove jednačine za potencijalnu energiju

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \in (0, l) \\ \infty, & x \notin (0, l) \end{cases},$$

odrediti talasne funkcije i spektar energije za česticu mase m koja se nalazi između beskonačnih zidova, smeštenih u $x = a$ i $x = b$. Posebno razmotriti slučaj $a = -b$.

2.36 Odrediti koeficijent refleksije i transmisije za česticu mase m i energije $E > 0$ koja se kreće u polju potencijalne energije $U(x) = aU_0\delta(x)$. Ovde su a i U_0 poznate pozitivne konstante.

2.37 Odrediti energiju i talasnu funkciju osnovnog stanja za česticu mase m koja se nalazi u privlačnom potencijalu $U(x) = -\rho\delta(x)$, gde je ρ data pozitivna konstanta.

2.38 Odrediti minimalnu širinu a potencijalne jame

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ -U, & 0 < x < a \\ 0, & x > a \end{cases}.$$

za koju se pojavljuje vezano stanje čestice mase m . Ovde je U pozitivna konstanta dimenzije energije koja određuje dubinu jame.

2.39 U pojednostavljenom modelu atoma pokraj zida elektron se nalazi u polju potencijala

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ -\alpha\delta(x-a), & x > 0 \end{cases}.$$

Ako je m masa elektrona a $\alpha > 0$ zadata konstanta, naći osnovno stanje i jednačinu iz koje se može odrediti njegova energija.

2.40* U atomu amonijaka NH_3 , atom azota ima potencijalnu energiju koja se može modelirati sa

$$U(x) = \begin{cases} U_a, & |x| < a \\ 0, & a < |x| < b \\ \infty, & |x| > b \end{cases}.$$

Razmotrimo slučaj kad za energiju azota važi $E < U_a$.

- a) Naći stacionarna stanja i jednačinu za vrednosti energije.
- b) Pokazati da je osnovno stanje simetrično, dok je prvo pobuđeno stanje antisimetrično.

2.41 Čestica mase m nalazi se u osnovnom stanju energije između beskonačno visokih zidova koji su na rastojanju a

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

Odjednom, zid u $x = a$ pomeri se u $x = 2a$. Odrediti dalju evoluciju stanja ove čestice.

2.42 Čestica mase m nalazi se u dvodimenzionnoj beskonačno dubokoj potencijalnoj jami. Odnos širine i dužine jame je 1 : 2. Naći degenerisano stanje minimalne energije.

2.43 Skicirati talasne funkcije i gustine verovatnoće osnovnog i prva dva pobuđena stanja čestice mase m u potencijalu

$$U(x) = \begin{cases} 0, & (x, y) \in K \\ \infty & (x, y) \notin K \end{cases},$$

gde je $K = \{(x, y) | x \in (0, a), y \in (0, a)\}$.

2.44* Neka su $\psi_k(x)$ i $\psi_{k+1}(x)$ talasne funkcije vezanih stanja kojima odgovaraju energije E_k i E_{k+1} respektivno, takve da je $E_k < E_{k+1}$. Ako su a i b dve uzastopne nule talasne funkcije ψ_k , pokazati da postoji tačka $c \in (a, b)$ takva da je $\psi_{k+1}(c) = 0$.

2.45 Slobodna čestica nailazi na barijeru širine a . Pretpostavljajući da je talasna funkcija u oblasti $x \in (0, a)$ ispod potencijalne barijere $U(x)$ data formulom koja se dobija iz WKB aproksimacije,

$$\psi(x) \sim \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int |p dx|}$$

odrediti koeficijent prolaza kroz barijeru,

$$T = \frac{|j_t|}{|j_{in}|} = \frac{|\psi(a)|^2}{|\psi(0)|^2} = e^{-2\gamma}.$$

gde je

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_0^a dx |p(x)|$$

Ovu približnu formulu za koeficijent transmisije prvi je dobio Gamow.

2.46 Koristeći WKB aproksimaciju, odrediti koeficijente refleksije i transmisije za česticu mase m koja s energijom $E < U_0$ nailazi na potencijalnu barijeru

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0 \frac{x}{a}, & 0 < x < a, \\ U_0, & a < x < b \\ U_0 \frac{a+b-x}{a}, & b < x < a+b \\ 0, & x > a+b \end{cases}.$$

2.47 Pri α -raspadu radioaktivno jezgro rednog broja Z spontano emituje α -česticu sastavljenu od dva protona i dva neutrona. Koristeći WKB aproksimaciju proceniti verovatnoću da α -čestica protunelira kroz Coulomb-ovu barijeru. Smatrati da je nuklearna interakcija kratkodomna i da se nakon nekog malog rastojanja a potencijalna energija α -čestice svodi na njenu Coulomb-ovu interakciju s jezgrom. Smatrati da je energija α -čestice je poznata.

2.48 Pomoću komande `DEigensystem` u programu za simboličko računanje *Mathematica*TM, naći prvih pet svojstvenih energija i odgovarajuća svojstvena stanja za česticu mase m koja je:

- a) u potencijalu harmonijskog oscilatora sopstvene frekvencije ω .
- b) između beskonačnih zidova smeštenih u $x = a$ i $x = b$.
- c) slobodna unutar jednakokrakog pravouglog trougla jedinične katete a van njega je potencijal beskonačan.

INTERMECO: FORMALIZAM

Svakodnevi jezik koji koristimo sadrži mnogo implicitnih pretpostavki, odnosno saznanja i informacija o stvarima i svetu koji opisuje¹. Na primer, opšte je poznato (a možda i tačno) da Eskimi imaju sto reči za sneg a nijednu za rat. Ili, očigledno, pre dvadesetprvog veka pojmovi andriod ili fejsbuk nisu postojali, tj. nisu imali odgovarajući sadržaj. Slično je i sa jezikom fizike. Fizika iz eksperimentalnih posmatranja identifikuje koji su to "aspekti realnosti" važni za opis prirode i pojava u njoj, i pridružuje im određene matematičke pojmove i strukture. Povezivanje brojeva koji se dobiju u eksperimentu sa matematičkim modelom je složen i nejednoznačan proces, i zavisi od skupa pojava koje opisujemo tj. od domena eksperimentalnih merenja. Zato nije neobično da se sa povećanjem ukupne spoznaje prirode i proširenjem eksperimentalnog znanja osnovni fizički koncepti i njihov matematički opis razvijaju i menjaju. Naravno kao i u običnom jeziku, jezik fizike sadrži više od svog neposrednog sadržaja: sadrži, makar u izvesnoj meri, interpretaciju.

Ovo poglavlje posvetićemo razradi i interpretaciji matematičkog formalizma kvantne mehanike. Na primerima jednodimenzionih sistema već smo delimično razvili intuiciju i upoznali osnovne kvantnomehaničke fenomene; za realistične trodimenzione probleme potrebno je još znanja. U pauzi između fizike i fizik, razradićemo matematiku: to će pomoći da se bolje razumeju osnovni pojmovi i sagleda celina, a veoma često i da se pojednostavi konkretni račun. Formalizam kvantne mehanike je i sam po sebi važan. On je tako kompaktan i konceptualno zaokružen da se neretko u udžbenicima uvodi na samom početku zadavanjem postulata, slično kao (što se može uraditi) u termodinamici. Mi smo se ovde opredelili za induktivni pristup, a jedan od razloga je što, kada se sa kvantne mehanike pređe na kvantnu teoriju polja, aksiomska formulacija (u ovom trenutku) nije dovoljna. Može se reći da sam koncept kvantovanja nije potpuno fiksiran nego da zavisi od fizičkog sistema na koji se primenjuje; ali ideja reprezentovanja fizičkih stanja vektorima u linearnom prostoru je uvek centralna. Zbog toga ćemo u nastavku češće govoriti o "principima kvantovanja" nego o "postulatima kvantne mehanike".

Prelaz sa Schrödinger-ove talasne mehanike na algebarsku formulaciju neophodan je između ostalog da bi se konzistentno opisali spin i izospin. U tom opisu, videćemo, opservabili

¹Ova rečenica je parafraza uvoda u poglavlje o formalizmu iz udžbenika J. L. Basdevant-a i J. Dalibard-a, *Quantum Mechanics*, Springer 2002: ovde je citiramo zato što je bez sumnje i tačna i relevantna. Tema ove glave, formalizam i interpretacije kvantne mehanike, mnogo je šira i dublja od samo fizike i prelazi u matematiku i filozofiju: mi se njome nećemo baviti više nego što je u udžbenicima uobičajeno. Usput, navedena knjiga ima odličan moto, citat svetog Avgustina: "Believe and you will understand; faith precedes, intelligence follows".

spina pridružuju se matrice. Mada je odgovarajuća oblast matematike, linearna algebra², jednostavnija od analize, fizička intuicija vezana za nju nije klasična: zato je ovaj korak netrivialan. Algebarska formulacija je omogućila razvoj ideje o unutrašnjim stepenima slobode, što je jedan od osnovnih koncepata fizike elementarnih čestica. Ali, na ideju da se fizičke veličine opisuju matricama Heisenberg je došao razmatrajući ne spin nego baš položaj i impuls čestice.

Matrična mehanika je uvedena pre talasne mehanike u tri rada iz 1925: u radovima Heisenberg-a, Born-a i Jordan-a i konačno Born-a, Heisenberg-a i Jordan-a; mi ćemo ukratko opisati neke od koraka u razvoju ove važne ideje³. U prvom od pomenutih radova Heisenberg se, konstatujući da fizička teorija ne treba da se bavi veličinama koje se ne mogu opservirati (kao što je na primer trajektorija elektrona u atomu), fokusira na spektre. Još od Bohr-a bilo je poznato da se frekvence linija u spektrima atoma dobijaju kao

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

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

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

kao i

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

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

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

Ako analogan izraz važi u kvantnom slučaju, treba da se odredi šta u njemu predstavlja vektor položaja \vec{r} , ili u jednoj dimenziji, x . Njegova pretpostavka bila je da, po analogiji sa Fourierovim razvojem u red

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

gde se koordinati x pridružuje Fourier-ova amplituda x_n , u ovom slučaju koordinati treba pridružiti izraz oblika

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

jer imamo dve energije, E_m i E_n , i frekvencu ω_{mn} . Veličina $(x)_{mn}$ je "kompleksna amplituda" koja karakteriše prelaz. Ako pretpostavimo da je amplituda simetrična na zamenu stanja, zbog (3.3) imamo

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

Centralno pitanje je: kako se izračunava amplituda kvadrata koordinate, $(x^2)_{mn}$, koja figuriše u snazi zračenja (3.4)? Najjednostavniji i najprirodniji način da se reprezentuje množenje amplituda bio je, po Heisenberg-u,

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

²Za uvod u osnovne pojmove linearne algebre preporučujemo udžbenike I. Milošević, i T. Vuković i S. Dmitrovića, <http://147.91.68.190/Biblioteka/Udzbenici.html>, pisane za studente fizike. Od ostalih mnogobrojnih udžbenika linearne algebre možda možemo da izdvojimo knjigu čuvenog matematičara I. M. Gel'fand-a koji je držao i kurseve za fizičare: *Lectures on Linear Algebra*, Dover Books on Mathematics, 1989.

³G. Emch, *Mathematical and Conceptual Foundations of 20th-Century Physics*, North Holland, 2000; S. Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, 2013.

odnosno

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

Mada je intuicija za (3.9) po svoj prilici proistekla iz osobina Fourier-ove transformacije odnosno iz izraza (2.248) za konvoluciju, ovom formulom Heisenberg je zapravo "otkrio" matricno množenje, koje je kao poznatu matematičku operaciju odmah prepoznao Born. Born i Jordan su, razume se, bili svesni neobičnosti ovog množenja jer su matrice koje se množe beskonačne (indeksi m, n, k su prirodni brojevi), ali su hteli da analiziraju njegove implikacije. Jedna od direktnih posledica je da množenje nije komutativno. Ako se, slično koordinati, i impulsu pridruži amplituda

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

imamo

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

a za dijagonalne elemente proizvoda impulsa i koordinate px i xp se dobija

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

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

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

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

odnosno

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

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

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

Veza između Heisenberg-ove matricne mehanike i talasne mehanike koju je predložio Schrödinger godinu dana kasnije, 1926, bila je predmet mnogih radova i žučnih rasprava, ali je najvažniji i najintuitivniji uvid imao Dirac koji je insistirao na *transformacionoj teoriji* koja povezuje ova dva opisa kvantne mehanike. Ekvivalentnost pristupa konačno je dokazana 1931. Stonevon Neumann-ovom teoremom o kojoj će biti reči kasnije.

3.1 Kinematika kvantne mehanike

Apstraktno posmatrano, osnovni pojam koji se u fizici koristi je pojam *fizičkog sistema*. U kontekstu konkretnih eksperimenata ovaj pojam može se raščlaniti na bar dva, jer su osobine koje se mere (fizičke opservable) u principu nezavisne od načina na koji se sistem preparira (stanje sistema)⁴. Prvi zadatak teorijskog opisa je da ovim pojmovima pridruži operativnu definiciju tj. konkretnu matematičku reprezentaciju: taj deo opisa u svakoj fizičkoj teoriji zovemo *kinematika*.

Sa stanovišta eksperimenta, početno *stanje sistema* može se identifikovati sa procedurom njegove preparacije. Pošto je jedna od najvažnijih osobina eksperimentalnog istraživanja ponovljivost rezultata merenja, u principu tražimo da se isto stanje može pripremiti više puta,

⁴Rezultat merenja naravno zavisi od stanja.

pa se isto merenje može više puta izvršiti⁵. Zbog toga se merenja, i onda kada ne očekujemo stohastičnost merenih opservabli, uvek vrše na većem broju identično prepariranih fizičkih objekata odnosno na *ansamblu*.

Drugi bazični pojam vezan za fizički sistem je pojam *opservable*, merljive osobine sistema: iskazi o opservablama nužno uključuju merne uređaje. Merenje daje skup mogućih ishoda odnosno izmerenih brojnih vrednosti opservable. Kada razmatramo sve rezultate merenja dobijene u (svim) različitim stanjima, taj skup potpuno karakteriše konkretnu opservablu. Ponavljanje i ponovljivost merenja važni su, između ostalog, i zbog procene greške.

Kinematika klasične mehanike formuliše se u *faznim prostoru*. Fazni prostor sistema koji ima n stepeni slobode je realni euklidski prostor \mathbb{R}^{2n} (ili neki njegov deo): to je prostor fizičkih stanja, tačaka (x_i, p_i) , $i = 1, \dots, n$, zadatih vrednostima svih komponenti koordinata i impulsa sistema. Ovakav opis je posledica činjenice da je drugi Newton-ov zakon diferencijalna jednačina drugog reda po vremenu, pa su njena rešenja jednoznačno određena početnim vrednostima položaja i brzina (impulsa) čestica u sistemu. Sa druge strane, položaji i impulsi čestica predstavljaju osnovni skup varijabli u mehanici jer su sve druge klasične opservable (kinetička energija, potencijalna energija, moment impulsa itd.) njihove funkcije. Drugim rečima: u klasičnoj mehanici, skup stanja fizičkog sistema i skup opservabli koje se na njemu mere opisuju se istim matematičkim objektom, i mogu se identifikovati.

Ovakav opis za kvantnu mehaniku (odnosno prirodu na malim rastojanjima) nije adekvatan: u suštini, zbog toga što iz njega direktno sledi neprekidnost svih opservabli. Iz eksperimenta znamo da određene opservable, kada se mere na dovoljno malim skalama, imaju diskretne, kvantovane vrednosti. Da bi se korektno opisao fenomen kvantovanja, ispostavlja se, u formalizmu mora da se razdvoji pojam stanja sistema od pojma opservable: oni su opisani različitim matematičkim objektima. A već smo videli, iz činjenice da postoje fenomeni interferencije i difrakcije za materijalne čestice sledi princip superpozicije, odnosno linearnost prostora stanja.

Prvi princip kvantovanja glasi: STANJU FIZIČKOG SISTEMA PRIDRUŽUJEMO NORMIRANU TALA-SNU FUNKCIJU ψ , ODNOSNO VEKTOR STANJA $|\psi\rangle$, KOJI JE ELEMENT VEKTORSKOG PROSTORA \mathcal{H} ⁶.

Linearni ili vektorski prostor \mathcal{H} , sa elementima ψ , χ , ϕ , je jedna od osnovnih matematičkih struktura i uvodi se u elementarnoj geometriji da bi se opisao položaj. Pored trodimenzionog euklidskog i četvorodimenzionog prostora Minkovskog, za fiziku najvažniji prostori su prostor kompleksnih brojnih kolona \mathbb{C}^m i prostor kvadratno-integrabilnih funkcija realne promenljive L_2 ; definicija vektorskog prostora i nekih osnovnih pojmova vezanih za njega data je u dodatku. U kvantnoj mehanici se uvek koristi vektorski prostor sa skalarnim proizvodom: *skalarni proizvod* vektorima ψ i ϕ pridružuje skalar, broj (ψ, ϕ) . U prostoru sa skalarnim proizvodom može se definisati *norma* vektora formulom $|\psi|^2 = (\psi, \psi)$.

U kvantnoj mehanici uobičajena je *Dirac-ova notacija*, u kojoj se elementi vektorskog prostora označavaju sa $|\psi\rangle$, $|\chi\rangle$, $|\phi\rangle$, itd. gde slovo ili slova unutar zagrade označavaju karakteristične osobine vektora. Osim "ket" vektora $|\psi\rangle$ uvodi i njegov dualni, "bra" $\langle\psi|$, koji se u slučaju brojnih kolona dobija adjungovanjem,

$$\langle\psi| = (|\psi\rangle)^\dagger. \quad (3.17)$$

⁵Činjenica da se neke pojave ne mogu ponoviti i proveriti pod kontrolisanim uslovima fizičare ne onemogućava da naprave odgovarajuću teoriju. Na primer, eksperimentalni podaci u astrofizici i kosmologiji su merenja događaja u svemiru, van laboratorije i pritom u prošlosti: ipak imamo teorije koje ta merenja tačno opisuju.

⁶Vrlo brzo ćemo ovaj postulat i precizirati: prostor je Hilbert-ov prostor, i proširiti: stanje može da bude i statistički operator odnosno matrica gustine.

Tada se skalarni proizvod ili zagrada na engleskom, "bracket", piše kao

$$(\psi, \phi) = \langle \psi | \phi \rangle. \quad (3.18)$$

Talasna funkcija kretanje čestice (koja nema dodatne, u odnosu na klasične, osobine), $\psi(\vec{r}, t)$, zavisi od tri koordinate i vremena. Ukoliko se sistem sastoji od N čestica, njegova talasna funkcija zavisi od koordinata svih čestica, $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$. Ona daje verovatnoću da čestice $1, \dots, N$ budu u infinitezimalnoj zapremini $dV_1 \dots dV_N$ oko tačke $(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ konfiguracionog prostora sistema,

$$dP(t) = \rho dV_1 \dots dV_N = |\psi|^2 dV_1 \dots dV_N. \quad (3.19)$$

Ukupna verovatnoća da se bilo koja čestica nađe bilo gde u prostoru je jednaka jedinici i ta normalizacija se, zbog jednačine kontinuiteta, u vremenu održava. Talasna funkcija sistema od N čestica uvek se može razviti po bazu koji je proizvod jednočestičnih talasnih funkcija, tzv. *nekorelisanom bazu*,

$$\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = \sum_{c_{i_1, i_2, \dots, i_N}} \psi_{i_1}(\vec{r}_1, t) \psi_{i_2}(\vec{r}_2, t) \dots \psi_{i_N}(\vec{r}_N, t), \quad (3.20)$$

što odgovara iskazu da je prostor stanja sistema od N čestica tenzorski proizvod jednočestičnih prostora,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N. \quad (3.21)$$

Tenzorski proizvod se koristi i kada dodajemo stepene slobode sistemu odnosno kad hoćemo da opišemo njegove dodatne "unutrašnje" osobine. Važan primer u kvantnoj mehanici su, videćemo kasnije, su spin i izospin čestice: zapravo sve osobine koje međusobno razlikuju elementarne čestice.

3.2 Opservable i merenja

Prvi princip kvantovanja je da je prostor stanja sistema \mathcal{H} vektorski prostor. Pod stanjem podrazumevamo statistički ansambl identično pripremljenih sistema, jer su rezultati merenja u principu opisani statističkom raspodelom verovatnoće. Stanja zavise od vremena t kao parametra i njihova dinamika data je Schrödinger-ovom jednačinom o čemu će biti reči kasnije. Uvedimo pre toga sledeći element fizičkog opisa: *opservable*.

Drugi princip kvantovanja je: FIZIČKE OPSERVABLE $\hat{A}, \hat{B}, \dots, \hat{M}$ OPISUJU SE HERMITSKIM OPERATORIMA KOJI DELUJU U PROSTORU STANJA \mathcal{H} . REZULTATI MERENJA OPSERVABLE \hat{A} SU NJENE SVOJSTVENE VREDNOSTI a_n , A SREDNJA VREDNOST KOJA SE DOBIJA MERENJEM U STANJU $|\psi\rangle$ JE $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$.

U kvantnoj mehanici je uobičajeno je da se opservable označavaju velikim latinskim, a stanja malim grčkim slovima sa kraja alfabeta; kapica se koristi da se naglasi da je određena veličina \hat{A} kvantna opservabla, a ne njen klasični ekvivalent, varijabla A . Ovako preciznu notaciju koristićemo uglavnom u ovoj glavi, odnosno samo onda kada postoji mogućnost da operatore pomešamo sa običnim funkcijama⁷.

Da analiziramo detaljnije sadržaj drugog postulata kvantovanja. Iskaz da su rezultati merenja svojstvene vrednosti operatora ima u stvari za posledicu da se fizičke opservable reprezentuju hermitskim operatorima, što se u ovoj formulaciji u stvari eksplicitno i traži⁸. (Svojstvene

⁷Dirac je kvantnomehaničke opservable u radovima nazivao "q-brojevi" (kvantni brojevi) da bi ih razlikovao od funkcija kompleksne promenljive odnosno č-brojeva": poslednji naziv se i danas često koristi.

⁸Kompaktniji i logički uređeniji skup postulata kvantne mehanike dat je u knjizi M. Damjanovića, *Incomplete lecture notes for the course QUANTUM MECHANICS 1 and 2*, <http://147.91.68.190/Biblioteka/Udzbenici.html>.

vrednosti hermitskog operatora su realne, a realan broj je jedino što se u laboratoriji očitava kao rezultat.) Ukoliko merimo opservablu \hat{A} na sistemu koji je u njenom svojstvenom stanju $|n\rangle$, za srednju vrednost se dobija

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle n | \hat{A} | n \rangle = a_n, \quad (3.22)$$

jer pretpostavljamo da je stanje normirano, $\langle n | n \rangle = 1$. Srednja vrednost od \hat{A}^2 je

$$\langle \hat{A}^2 \rangle = \langle n | \hat{A}^2 | n \rangle = a_n^2. \quad (3.23)$$

Prema tome, disperzija od \hat{A} u svojstvenim stanjima je nula,

$$(\Delta \hat{A})^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 = 0, \quad (3.24)$$

odnosno kada merimo na ansamblu, merenje na svakom pojedinačnom sistemu daje isti rezultat, a_n . Ukoliko stanje nije svojstveno od \hat{A} ,

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad (3.25)$$

očekivana vrednost ove opservable je

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n c_n^* \langle n | \hat{A} \sum_l c_l |l\rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n = \sum_n \rho_n a_n. \quad (3.26)$$

Koeficijenti c_n u razvoju vektora $|\psi\rangle$ po svojstvenom bazu $|n\rangle$ daju *raspodelu verovatnoće*, $\rho_n = |c_n|^2$, pri merenju \hat{A} . Kažemo da je ρ_n verovatnoća prelaza iz stanja $|\psi\rangle$ u stanje $|n\rangle$ jer se posle merenja svi elementi podansambla na kojima je dobijen rezultat a_n nalaze u stanju $|n\rangle$. Ovo tzv. *Born-ovo pravilo* se ponekad izdvaja kao poseban postulat o verovatnoći ili

Treći princip kvantovanja: VEROVATNOĆA DA SE PRI MERENJU OPSERVABLE \hat{A} NA SISTEMU KOJI JE U KVANTNOM STANJU $|\psi\rangle$ DOBIJE REZULTAT a_n JE $P(A, a_n, \psi) = \rho_n = \langle \psi | P_n | \psi \rangle$. OPŠTIJE, VEROVATNOĆA PRELAZA IZ STANJA $|\psi\rangle$ U STANJE $|\chi\rangle$ JE $|\langle \psi | \chi \rangle|^2$.

Osobine hermitskih operatora u beskonačnodimenzionom prostoru dosta su komplikovane od osobina matrica. O Hilbert-ovom prostoru kvadratno-integrabilnih funkcija govorićemo kasnije bez velike preciznosti. Jedna od važnih razlika je da, dok u n -dimenzionom prostoru spektar operatora može da ima najviše n tačaka, u beskonačnodimenzionom prostoru spektar u principu ima beskonačno tačaka, pri čemu to može biti i diskretno i kontinualno beskonačno. Svojstvene funkcije hermitskog operatora i dalje su ortogonalne mada, kada je spektar kontinualan, ne mogu da se normiraju: važe uopštenja relacija (3.201) i (3.203) koja ćemo u narednim poglavljima napisati i diskutovati.

Karakteristični primeri operatora definisanih u prostoru funkcija su koordinata i impuls. Već smo videli da se impuls čestice opisuje operatorom diferenciranja koji na stanje $\psi(x)$ deluje kao

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}. \quad (3.27)$$

Slično, operator položaja \hat{x} zadat je množenjem nezavisno promenljivom x ,

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x). \quad (3.28)$$

Definicije (3.27) i (3.28) usklađene su sa izrazima za očekivane vrednosti koordinate i impulsa koje smo koristili u prethodnoj glavi i koje smo uveli intuitivno, na osnovu koncepta gustine verovatnoće i fluksa verovatnoće:

$$\langle \hat{x} \rangle = \int \psi^* x \psi dx, \quad (3.29)$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \int \psi^* \left(-i\hbar \frac{d\psi}{dx} \right) dx. \quad (3.30)$$

Posebno je važan komutator koordinate i impulsa. Iz definicije dobijamo

$$[\hat{x}, \hat{p}] \psi(x) = -i\hbar x \frac{d\psi}{dx} + i\hbar \frac{d(x\psi)}{dx} = i\hbar \psi(x), \quad (3.31)$$

odnosno

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar I, \quad (3.32)$$

pošto jednakost (3.31) važi za proizvoljno stanje $\psi(x)$. Relacija (3.32) zove se Heisenberg-ova relacija a struktura njom zadata, *Heisenberg-ova algebra*. Ona predstavlja, videćemo kasnije, osnovu za kanonsko kvantovanje klasičnih fizičkih sistema.

3.3 Hilbert-ov prostor^{*}

Matematički formalizam, kako je ovde dat i korišćen, i da je nešto precizniji bio bi daleko od matematičke strogosti. Takav pristup dosta je čest u udžbenicima i bazira se, sa jedne strane, na analogiji velikog broja osobina konačnih i beskonačnodimenzionih Hilbert-ovih prostora, a takođe i na važnom rezultatu o ekvivalentnosti matrice i talasne mehanike koji je u formalizmu dat kroz Dirac-ovu notaciju. S druge strane, takav pristup bio je verovatno jedan od povoda von Neumann-u da napiše Matematičke osnove kvantne mehanike⁹, knjigu veoma važnu za zasnivanje oblasti, gde u uvodu kaže: "Gore pomenuti Dirac-ov metod (a ovo se prenebregava u velikom delu kvantnomehničke literature, zbog (njegove) jasnoće i elegancije), ni na koji način ne zadovoljava zahteve matematičke strogosti – čak ni ako se ti zahtevi redukuju na nivo koji je inače uobičajen u drugim oblastima teorijske fizike". Verovatno je ova ocena prestoga: mi ćemo ipak posvetiti ovo poglavlje preciziranju i izvesnim dopunama formalizma. Prvo i najviše zbog česte upotrebe termina, daćemo definiciju Hilbert-ovog prostora, a zatim i definiciju dualnog prostora odnosno funkcionala i uopštenih funkcija. Na kraju, pobrojaćemo neke od pojmove iz teorije operatora. Ovo poglavlje je u stvari neka vrsta legende relevantnih pojmova i treba da pomogne pri snalaženju u literaturi iz funkcionalne analize.

Precizno formulisan, prvi postulat kvantne mehanike je: PROSTOR STANJA FIZIČKOG SISTEMA JE SEPARABILNI HILBERT-OV PROSTOR. Većinu pojmova koji se u gornjoj rečenici koriste već smo uveli, ali da dopunimo. *Hilbert-ov prostor* je konačno ili beskonačnodimenzioni linearni prostor sa skalarnim proizvodom, koji je *potpun*¹⁰. Videli smo da je skalarni proizvod važan za statističku interpretaciju; sem toga, u apstraktno definisani prostor stanja skalarni proizvod uvodi pojmove norme i rastojanja. *Norma* vektora ψ iz vektorskog prostora \mathcal{H} je funkcional koji vektoru pridružuje realan broj, $\|\cdot\|: \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$, i ima sledeće osobine:

$$\begin{aligned} \|\psi\| &\geq 0, \quad \|\psi\| = 0 \text{ samo ako je } \psi = 0, \\ \|\psi + \phi\| &\leq \|\psi\| + \|\phi\| \quad (\text{nejednakost trougla}), \\ \|a\psi\| &= |a| \|\psi\|. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Rekli smo da u prostoru sa skalarnim proizvodom norma može da se definiše kao

$$\|\psi\| = \langle \psi | \psi \rangle, \quad (3.34)$$

⁹J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, 1955.

¹⁰Normirani vektorski prostor koji je potpun naziva se *Banach-ov prostor*: norma može da se definiše i u prostoru bez skalarnog proizvoda, relacijama (3.33). Ako norma zadovoljava dodatnu relaciju paralelograma, $\|\psi + \chi\|^2 + \|\psi - \chi\|^2 = 2\|\psi\|^2 + 2\|\chi\|^2$, ona definiše skalarni proizvod.

pri čemu se nejednakost trougla svodi na Cauchy-Schwarz-ovu nejednakost. Prostor sa normom je *metrički prostor* a rastojanje elemenata ψ i ϕ je

$$d(\psi, \phi) = \|\psi - \phi\|. \quad (3.35)$$

Sada možemo da definišemo potpunost. Prostor \mathcal{H} je *potpun* ako u njemu svaki Cauchy-jev (fundamentalni) niz konvergira, tj. ako osim elemenata, i limes svakog Cauchy-jevog niza pripada \mathcal{H} . Da se podsetimo: niz ψ_n nazivamo Cauchy-jevim ako za proizvoljno malo ϵ postoji n tako da je rastojanje $d(\psi_k, \psi_m) \leq \epsilon$ za sve članove niza počevši od n -tog ($k, m \geq n$). Potpunost vektorskog prostora je matematički dosta prirodan zahtev zatvorenosti strukture: u klasičnoj mehanici npr. fizičke promenljive uvek opisujemo brojevima realne ose koja se dobija upotunjavanjem skupa racionalnih brojeva. Slično tome, dodavanjem graničnih vrednosti svih Cauchy-jevih nizova svaki vektorski prostor može da se upotpuni.

Zahtev separabilnosti prostora stanja je manje intuitivan. *Separabilnim* se naziva vektorski prostor \mathcal{H} koji ima prebrojiv svuda gust podskup \mathcal{S} , tj. podskup za koji važi: za svaki broj $\epsilon > 0$ i svaki vektor $\psi \in \mathcal{H}$ postoji vektor $\chi \in \mathcal{S}$ takav da je rastojanje $d(\psi, \chi) \leq \epsilon$. Znači, stanja iz \mathcal{H} mogu se sa proizvoljnom preciznošću aproksimirati stanjima iz prebrojivog podskupa. Ovakav međusobni odnos imaju opet skup racionalnih i skup realnih brojeva: svaki realan broj može se proizvoljno dobro aproksimirati racionalnim, a racionalni brojevi su prebrojivi. U svom udžbeniku funkcionalne analize¹¹ S. Kurepa kaže da separabilni Hilbert-ov prostor "nije ni malen jer je beskonačnodimenzion, a ni prevelik jer je separabilan". Separabilni Hilbert-ovi prostori imaju nekoliko osobina važnih za kvantnu mehaniku: svaki ortonormirani skup vektora ovakvog prostora je prebrojiv; prostor ima ortonormirani basis; konačno, svaka dva separabilna Hilbert-ova prostora su izomorfna.

Slično uslovu potpunosti, uslov separabilnosti nije direktno povezan sa nekom specifičnom fizičkom osobinom i zapravo je u neku ruku zahtev da stanja imaju određeniju, bolje definisanu strukturu: to po pravilu daje dodatne osobine i pojednostavljuje teorijska razmatranja. Ima međutim primera u fizici da se za kinematički prostor stanja uzima neseparabilan prostor: npr. u "loop-kvantnoj kosmologiji, prostor stanja (sferno-simetričnog svemira) je zadat Bohr-ovom kompakifikacijom realne ose koju ćemo opisati u zadatku kasnije. Generalno, pri prelazu na sisteme sa beskonačno mnogo stepeni slobode nekada moramo da oslabimo i bazične zahteve. Na primer, činjenica da prostor-vreme nema euklidsku metriku implicira da se na prostoru stanja kvantnih polja ne može a priori zadati (pozitivno definitan) skalarni proizvod. Ovaj problem rešava se na različite načine: kod Gupta-Bleuler-ovog kovarijantnog kvantovanja elektromagnetnog polja polazi se od prostora stanja sa indefinitnom metrikom, a Lorentz-ov kalibracioni uslov, $\langle \psi | \partial_\mu \hat{A}^\mu | \psi \rangle = 0$, redukuje taj početni prostor na potprostor fizičkih stanja za koja važi $\langle \psi | \psi \rangle \geq 0$. U stvari, u kvantnoj teoriji polja prostor stanja, tzv. Fock-ov prostor, po pravilu se uvodi konstrukcijom, između ostalog zbog toga što ne važi analogon Stone-von Neumann-ove teoreme (koja, grubo, kaže da je u kvantnoj mehanici prostor kvantnih stanja u suštini jednoznačan, tj. da su sve relevantne reprezentacije Heisenberg-ove algebre ekvivalentne). Mi se ovde naravno ograničavamo na mehaniku. Osim prostora brojnih kolona, dva najvažnija primera separabilnog Hilbert-ovog prostora su prostor konvergentnih nizova ℓ_2 i prostor kvadratno-integrabilnih funkcija L_2 .

Uslov potpunosti Hilbert-ovog prostora, jasno je, ne može da uključi svojstvena stanja koordinate i impulsa u fizička stanja. Sa druge strane, kao što je Dirac odlično razumeo, δ -funkcija (iako nije ni neprekidna ni funkcija) je važna kako za račun tako i za konceptualno zaokruženje formalizma, i počela je široko da se koristi u fizici i pre nego što je 1944. L. Schwartz dao njen

¹¹S. Kurepa, *Funkcionalna analiza*, Školska knjiga, 1981.

matematički konzistentan opis preko teorije distribucija¹². Navešćemo ovde nekoliko definicija, a δ -funkciju ćemo kasnije "pešački" uvesti kao limes familije neprekidnih funkcija.

Pođimo od prostora kvadratno-integrabilnih funkcija $\mathcal{H} = L_2$ i njegovog potprostora \mathcal{D} , tzv. prostora probnih funkcija. *Dualni prostor* \mathcal{D}^* prostora \mathcal{D} je skup svih linearnih neprekidnih preslikavanja iz \mathcal{D} u kompleksne brojeve (opštije, u polje \mathbb{F}). Elementi dualnog prostora zovu se *funkcionalni*, odnosno *distribucije* ili *uopštene funkcije*, $f \in \mathcal{D}^*$:

$$\begin{aligned} \text{funkcional:} \quad & f: \psi \mapsto f[\psi], \quad \psi \in \mathcal{D}, \quad f[\psi] \in \mathbb{C} \\ \text{linearnost:} \quad & f[a\psi + b\phi] = af[\psi] + bf[\phi] \\ \text{neprekidnost:} \quad & \psi_n \rightarrow \psi \Rightarrow f[\psi_n] \rightarrow f[\psi]. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Zbog svojih osobina skalarni proizvod definiše, formulom $f_\varphi[\psi] = (\varphi, \psi)$, funkcional f_φ za svako stanje φ . U Hilbert-ovom prostoru važi i obrnut iskaz, Riesz-ova teorema: za svaki funkcional $f \in \mathcal{H}^*$ postoji jedinstveni vektor $\varphi \in \mathcal{H}$ takav da je

$$f[\psi] = (\varphi, \psi), \quad \psi \in \mathcal{H}. \quad (3.37)$$

Posledica ove teoreme je da su \mathcal{H} i \mathcal{H}^* izomorfni, pa njihove elemente možemo da identifikujemo: u slučaju L_2 , funkcionalne identifikujemo sa funkcijama.

Netrivijalne dualne prostore \mathcal{D}^* imaju pravi potprostori, $\mathcal{D} \subset \mathcal{H}$: pošto je, dosta se lako vidi, $\mathcal{H}^* \subset \mathcal{D}^*$, elemente dualnog prostora \mathcal{D}^* zovemo *uopštene funkcije*. Jasno, što je manji \mathcal{D} , to je veći \mathcal{D}^* . Kažemo da su dve uopštene funkcije jednake ako su njihove vrednosti jednake za svako $\psi \in \mathcal{D}$. U ovom kontekstu se δ -funkcija $\delta(x - a)$ definiše kao

$$\delta_a[\psi] = \psi(a) \quad (3.38)$$

odnosno

$$\int \delta(x - a)\psi(x) dx = \psi(a), \quad (3.39)$$

a skup probnih funkcija čine sve neprekidne funkcije. Jasno je da je ovaj skup pravi podskup od L_2 (mada je dovoljan da se opišu sva fizička stanja). Ako želimo da u uopštene funkcije uvrstimo i prvi izvod, $\delta'(x - a)$, skup probnih funkcija ćemo dalje suziti na neprekidne kvadratno-integrabilne funkcije sa neprekidnim prvim izvodom.

Konačno, da kažemo nešto o hermitskim odnosno autoadjungovanim operatorima. Teorija operatora je jedan od najvažnijih delova funkcionalne analize, i u matematici je proizašla iz teorije diferencijalnih jednačina¹³. Kada se u udžbenicima funkcionalne analize govori o linearnim operatorima na prostoru \mathcal{H} , često se podrazumevaju operatori koji su linearni i ograničeni. *Ograničenost* operatora \hat{A} znači da postoji konstanta c takva da je

$$|\hat{A}\psi| \leq c|\psi|, \quad \forall \psi \in \mathcal{H}. \quad (3.40)$$

Na Hilbert-ovom prostoru važi da je svaki ograničen operator i neprekidan, pri čemu se *neprekidnost* operatora definiše sledećom osobinom:

$$\text{ako } \psi_n \rightarrow \psi, \text{ onda } \hat{A}\psi_n \rightarrow \hat{A}\psi, \quad \psi_n, \psi \in \mathcal{H}. \quad (3.41)$$

Međutim, jasno je da operatori koji su nam važni u fizici kao što je izvod nisu ograničeni, tj. ne zadovoljavaju uslov (3.40) ni za jedan fiksirani broj c . Zato se definicija linearnog operatora

¹²V. S. Vladimirov, *Generalized Functions in Mathematical Physics*, Mir Publishers, 1979.

¹³Standardna monografija za teoriju operatora je N. Dunford, J. T. Schwartz, *Linear Operators*, J. Wiley & Sons, 1957. Mi se nećemo upuštati skoro ni u jedan njen detalj čak ni na nivou definicija, iako se za precizno izvođenje rezultata u teoriji perturbacija i teoriji rasejanja zapravo koristi funkcionalna analiza. Ali to je onaj, po von Neumann-u, uobičajeni nivo nepreciznosti u teorijskoj fizici.

obično proširuje: linearni operator \hat{A} je linearno preslikavanje sa domena $\mathcal{D}(\hat{A}) \subset \mathcal{H}$ u \mathcal{H} (tj. uključujemo i preslikavanja koja nisu dobro definisana na celom prostoru), ali $\mathcal{D}(\hat{A})$ mora da bude *svuda gust* skup u \mathcal{H} . Između ostalog, jedino kada je $\mathcal{D}(\hat{A})$ svuda gust može jednoznačno da se definiše adjungovani operator \hat{A}^\dagger formulom (3.197),

$$(\chi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^\dagger \chi, \psi) \quad (3.42)$$

koja onda važi ne za sve vektore nego za vektore $\psi \in \mathcal{D}(\hat{A})$. Domeni operatora \hat{A} i \hat{A}^\dagger u principu nisu jednaki nego je $\mathcal{D}(\hat{A}) \subset \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$, pa uslov autoadjungovanosti operatora \hat{A} zapravo čine dva uslova: da \hat{A} i \hat{A}^\dagger isto deluju na funkcije i da je $\mathcal{D}(\hat{A}) = \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$. Indikacija da li je \hat{A} autoadjungovani ili nije su jednačine

$$\hat{A}\psi = \pm i\psi \quad (3.43)$$

koje imaju oblik svojstvene jednačine za imaginarne svojstvene vrednosti $\pm i$. Brojevi normalizabilnih rešenja jednačine (3.43), n_\pm , zovu se *indeksi defekta*: ako je $n_+ = n_-$, operator \hat{A} je esencijalno autoadjungovan tj. može se, redefinicijom domena, proširiti do hermitskog.

I spektar se u funkcionalnoj analizi definiše opštije. *Spektar operatora* \hat{A} je skup svih brojeva a za koje je $\hat{A} - a\hat{I}$ singularan operator; komplementarne tačke, one za koje je $\hat{A} - a\hat{I}$ regularan, čine *rezolventni skup* operatora \hat{A} , a $(a\hat{I} - \hat{A})^{-1}$ se naziva *rezolventa*. Može se pokazati da svaki neprekidni operator ima bar jednu tačku u spektru. U opštem slučaju, spektar ima tri dela: diskretni spektar, kontinualni spektar i rezidualni spektar. Tačke diskretnog spektra su (prave) svojstvene vrednosti operatora kojima odgovaraju svojstveni vektori, dok tačke kontinualnog spektra nemaju odgovarajuće svojstvene vektore u prostoru \mathcal{H} . Ispostavlja se da su rezidualni spektri autoadjungovanih i unitarnih operatora prazni skupovi, pa za njih važe formule analogne sa (3.201) i (3.203), koje pišemo simbolički, bez eksplicitnog uključivanja degeneracije svojstvenih vrednosti:

$$\hat{A} = \sum_n a_n |n\rangle\langle n| + \int a |a\rangle\langle a| da, \quad \hat{I} = \sum_n |n\rangle\langle n| + \int |a\rangle\langle a| da. \quad (3.44)$$

Iako je u poslednjoj formuli oznaka $|a\rangle$ formalna jer $|a\rangle$ nije vektor iz Hilbert-ovog prostora, operatori definisani sa

$$\hat{P}_{[c,d]} = \int_c^d |a\rangle\langle a| da \quad (3.45)$$

su pravi projektori za svaki konačan podinterval $[c, d]$ kontinualnog spektra.

3.4 Matrica gustine

I konačno da generalizujemo još jedanput prvi postulat, onaj o stanjima. Rekli smo da kvantno stanje identifikujemo sa ansamblom koji se sastoji od velikog broja pojedinačnih fizičkih sistema koji su pripremljeni na isti način. Postavlja se sledeće prirodno pitanje: možemo li u teorijskom opisu da objedinimo rezultate dva merenja iste opservable, koja su izvršena na dva različita ansambla (ansambl se sastoji od pojedinačnih sistema iste prirode)? Ili obrnuto: možemo li ansambl da podelimo na dva podansambla, i da odgovarajuće rezultate posmatramo kao rezultate posebnih merenja? Jasno je da se ovo praktično tj. u eksperimentu može učiniti, pa je prirodno da i u teoriji koncept ili pojam ansambla upotpunimo u odnosu na "operaciju unije" više podansambala i merenja.

U cilju da se pojam ansambla kompletira, potrebno je da se uvede pojam homogenog (ireducibilnog) ansambla ili čistog stanja¹⁴. *Homogeni kvantni ansambl* je onaj, čiji svaki pod-

¹⁴Precizna i detaljna diskusija o čistim i mešanim stanjima data je u udžbeniku F. Herbuta *Kvantna mehanika za istraživače*, Univerzitet u Beogradu, 1982.

ansambl daje iste rezultate merenja svih opservabli kao i ceo ansambl. Homogeni ansambl je *čisto stanje* i opisuje se talasnom funkcijom ili vektorom $|\psi\rangle$. Sa druge strane, nehomogeni ansambl ili *mešano stanje* je unija dva ili više homogenih ansambala (koje bismo u principu u nekom merenju mogli da razlikujemo). Mešano stanje opisuje se *matricom gustine*

$$\hat{\rho} = \sum_k w_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|, \quad (3.46)$$

gde su brojevi w_k statističke težine pojedinih podansambala,

$$w_k \geq 0, \quad \sum_k w_k = 1, \quad (3.47)$$

a čista stanja $|\psi_k\rangle$ koja su pomešana mogu a ne moraju biti ortogonalna.

Matrica gustine ili *statistički operator* definiše se kao pozitivan operator jediničnog traga. U specijalnom slučaju čistog stanja statistički operator je projektor,

$$\hat{\rho}_\psi = |\psi\rangle \langle \psi|, \quad \hat{\rho}_\psi^2 = \hat{\rho}_\psi, \quad (3.48)$$

dok je u ostalim slučajevima $\hat{\rho}^2 < \hat{\rho}$.

Formule za očekivane vrednosti i verovatnoće koje smo napisali za čisto stanje mogu se uopštiti. Iz postulata o opservablama i verovatnoći, za verovatnoću rezultata a_n pri merenju opservable \hat{A} i za njenu srednju vrednost imamo

$$\begin{aligned} P(\hat{A}, a_n, \psi) &= \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle = \text{Tr} \hat{P}_n |\psi\rangle \langle \psi|, \\ \langle \hat{A} \rangle &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \text{Tr} \hat{A} |\psi\rangle \langle \psi|. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Ovo lako uopštavamo na mešano stanje: verovatnoće i očekivana vrednost su dati sa

$$P(\hat{A}, a_n, \hat{\rho}) = \text{Tr} \hat{P}_n \hat{\rho}, \quad \langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} \hat{A} \hat{\rho}. \quad (3.50)$$

Vidi se da ove formule tačno odražavaju proces mešanja ili unije podansambala u ansambl. Na primer, ako su očekivane vrednosti opservable \hat{A} na podansamblima date brojevima $\langle \hat{A} \rangle_k$, očekivana vrednost na celom ansamblu je

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_k w_k \langle \hat{A} \rangle_k. \quad (3.51)$$

Možda nije na prvi pogled očigledno da li je stanje koje je linearna kombinacija odnosno *koherentna mešavina* stanja $|n\rangle$,

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad (3.52)$$

različito od mešanog stanja odnosno nekoherentne mešavine

$$\hat{\rho} = \sum_n |c_n|^2 |n\rangle \langle n|. \quad (3.53)$$

Matematički, razlika je očigledna jer

$$\hat{\rho}_\psi = |\psi\rangle \langle \psi| = \sum_{n,m} c_n^* c_m |n\rangle \langle m| \neq \sum_n |c_n|^2 |n\rangle \langle n|, \quad (3.54)$$

ali ona u nekim fizičkim razmatranjima nije uvek jasna. Zapravo, stanja $\hat{\rho}$ i $\hat{\rho}_\psi$ se ne razlikuju u merenjima opservabli koje su kompatibilne sa $\hat{\rho}$, tj. koje su oblika $\hat{A} = \sum a_n |n\rangle \langle n|$. Međutim, u merenju nekompatibilne opservable $\hat{B} = \sum b_{mn} |m\rangle \langle n|$ ona se mogu razlikovati jer je

$$\begin{aligned} \langle \hat{B} \rangle_\rho &= \text{Tr} \hat{B} \hat{\rho} = \sum_n b_{nn} |c_n|^2, \\ \langle \hat{B} \rangle_\psi &= \text{Tr} \hat{B} \hat{\rho}_\psi = \sum_{n,m} b_{mn} c_m^* c_n. \end{aligned} \quad (3.55)$$

3.5 Relacije neodređenosti

Dokazaćemo sada iskaz koji kao specijalan slučaj sadrži Heisenberg-ove relacije neodređenosti. On glasi: AKO SU \hat{A} I \hat{B} OPSERVABLE TJ. HERMITSKI OPERATORI, PROIZVOD NEODREĐENOSTI $\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}$ U FIZIČKIM STANJIMA $|\psi\rangle$ ZADOVOLJAVA NEJEDNAKOST

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \geq \frac{1}{2} |\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|. \quad (3.56)$$

Relacije neodređenosti dokazuju se korišćenjem Cauchy-Schwarz-ove nejednakosti. Označimo

$$\hat{A}' = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle = \hat{A} - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle, \quad |\phi\rangle = \hat{A}'|\psi\rangle, \quad (3.57)$$

i slično

$$\hat{B}' = \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle = \hat{B} - \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle, \quad |\chi\rangle = \hat{B}'|\psi\rangle. \quad (3.58)$$

Iz relacije

$$\langle\phi|\phi\rangle = \langle\psi|\hat{A}'^2 - 2\hat{A}'\langle\hat{A}\rangle + \langle\hat{A}\rangle^2|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}'^2|\psi\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2 = (\Delta\hat{A})^2 \quad (3.59)$$

i njoj analogne za $\langle\chi|\chi\rangle$, dobijamo vezu između levih strana nejednakosti (3.181) i (3.56):

$$\langle\phi|\phi\rangle\langle\chi|\chi\rangle = (\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2. \quad (3.60)$$

Sa druge strane, pošto se od hermitskog \hat{A} razlikuje za realnu konstantu, \hat{A}' je hermitski operator pa je

$$\langle\phi|\chi\rangle = \langle\psi|\hat{A}'\hat{B}'|\psi\rangle = \langle\psi|\frac{1}{2}\{\hat{A}', \hat{B}'\} + \frac{1}{2}[\hat{A}', \hat{B}']|\psi\rangle, \quad (3.61)$$

gde je sa $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ označen *antikomutator* operatora \hat{A} i \hat{B} ,

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}. \quad (3.62)$$

Koristeći $[\hat{A}', \hat{B}'] = [\hat{A}, \hat{B}]$, poslednju relaciju možemo da napišemo i kao

$$\langle\phi|\chi\rangle = \frac{1}{2}\langle\{\hat{A}', \hat{B}'\}\rangle + \frac{1}{2}\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle. \quad (3.63)$$

Već smo rekli da su očekivane vrednosti hermitskog operatora realni, a antihermitskog imaginarni brojevi. Sa druge strane, iz osobina adjungovanja sledi da je antikomutator, tj. simetrizovani zbir dva hermitska operatora hermitski, dok je komutator antihermitski operator. Zato je (3.63) u stvari razlaganje kompleksnog broja $\langle\phi|\chi\rangle$ na njegov realni i imaginarni deo, pa imamo

$$|\langle\phi|\chi\rangle|^2 = \frac{1}{4}|\langle\{\hat{A}', \hat{B}'\}\rangle|^2 + \frac{1}{4}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|^2 \geq \frac{1}{4}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|^2, \quad (3.64)$$

što dokazuje relacije neodređenosti.

U specijalnom slučaju kada su \hat{A} i \hat{B} koordinata i impuls, $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, dobijamo da je proizvod neodređenosti $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}$ ograničen odozdo,

$$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (3.65)$$

i to je *Heisenberg-ova relacija neodređenosti*. Opservable \hat{x} i \hat{p} nazivaju se *komplementarnim*. Heisenberg-ova relacija znači da je nemoguće meriti istovremeno i položaj i impuls čestice sa proizvoljno malom greškom. Ova nemogućnost nije tehničke prirode, ne sledi iz nesavršenosti instrumenata već je principijelna, inherentna osobina kvantnomehaničkog opisa. Stanja za koja je vrednost proizvoda $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}$ minimalna i jednaka $\hbar/2$ nazivaju se *koherentna stanja*: već

smo videli da su to talasne funkcije koje imaju oblik Gauss-ovog paketa. Zbog svoje osobine da imaju "maksimalno dobrodefinisan položaj i brzinu, koherentna stanja najpribližnije opisuju klasičnu slobodnu česticu. Sa druge strane, ako se ograničimo na merenje samo jedne od komplementarnih veličina npr. na položaj, jasno je da je u principu moguće realizovati niz merenja u kojima se greška smanjuje odnosno teži nuli. Pri tome se naravno neodređenost impulsa povećava.

Relacije neodređenosti daju nam potreban (i dovoljan) uslov da dve opservable mogu da se izmere istovremeno: uslov je da opservable komutiraju

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0. \quad (3.66)$$

Ovakve opservable zovu se *kompatibilne opservable*. Iz linearne algebre znamo da se one mogu istovremeno dijagonalizovati, odnosno da imaju zajednički svojstveni bazis.

3.6 Operatori koordinate i impulsa

Kao što smo videli, u prostoru talasnih funkcija kanonsku komutacionu relaciju

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (3.67)$$

realizuju multiplikativni i diferencijalni operator

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x), \quad \hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}. \quad (3.68)$$

Koordinata i impuls su osnovne veličine koje opisuju česticu pa je važno da ih razumemo i sa formalne odnosno matematičke strane, da ispitamo njihove osobine kao što su spektar, svojstvene funkcije itd. Ispostavlja se da se ovi operatori po svojim osobinama veoma razlikuju se od matrica: oba operatora su neograničena a spektar im je kontinualan. Doduše, da Heisenberg-ova algebra nema konačne reprezentacije lako se vidi: u prostoru $m \times m$ matrica, trag leve strane jednačine (3.67) je nula a trag desne $i\hbar m$, što je kontradikcija. Sa druge strane, u beskonačnodimenzionom slučaju trag i operacije pod tragom definisane su samo kada sve konvergira, što nije slučaj sa (3.67).

Napišimo svojstvenu jednačinu za koordinatu

$$\hat{x}\psi_a(x) = x\psi_a(x) = a\psi_a(x). \quad (3.69)$$

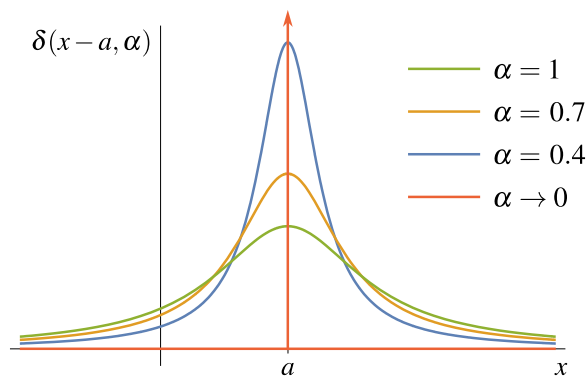
Očigledno je da ova jednačina nema rešenja u skupu neprekidnih funkcija jer zahteva da funkcija $\psi_a(x)$ pomnožena nezavisno promenljivom x u svakoj tački ima istu vrednost kao kada se pomnoži konstantom a . Rešenje jednačine može se naći u klasi uopštenih funkcija: to delta-funkcija $\delta(x-a)$, "funkcija" koja u svim tačkama ima vrednost nula osim u $x=a$, gde je beskonačna.

Da bismo stekli intuitivnu predstavu o δ -funkciji uvešćemo jednu od familija neprekidnih funkcija čiji je limes $\delta(x-a)$. Posmatrajmo za $\alpha > 0$ funkcije

$$\delta(x-a, \alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha|k|+ik(x-a)} dk = \frac{1}{\pi} \frac{\alpha}{\alpha^2 + (x-a)^2}. \quad (3.70)$$

Lako se vidi da je, za svako α , funkcija $\delta(x-a, \alpha)$ parna oko tačke $x=a$, pozitivna i da ima maksimum u $x=a$. Takođe, nezavisno od α ,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a, \alpha) dx = 1. \quad (3.71)$$



Slika 3.1: Granični postupak koji dovodi do Dirac-ove δ -funkcije.

Delta-funkcija može da se definiše kao limes

$$\delta(x-a) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \delta(x-a, \alpha), \quad (3.72)$$

a iz (3.70) vidimo da su njene vrednosti

$$\delta(x-a) = \begin{cases} 0, & x \neq a \\ \infty, & x = a \end{cases}. \quad (3.73)$$

Pošto integral (3.71) ne zavisi od α , imamo i

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a) dx = 1. \quad (3.74)$$

Poslednja formula na neki način kvantifikuje kolika je singularnost δ -funkcije u tački a . Ako u (3.70) uzmemo limes $\alpha \rightarrow 0$, dobijamo Fourier-ovu transformaciju δ -funkcije

$$\delta(x-a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-a)} dx. \quad (3.75)$$

U reprezentaciji (3.72) može se pokazati da važi i

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a) \psi(x) dx = \psi(a). \quad (3.76)$$

Dokaz se izvodi za funkcije $\psi(x)$ koje su dovoljno regularne da se redosled limesa i integracije može menjati, i dobija se razvojem $\psi(x)$ u Taylor-ov red oko a .

Postoje i druge familije funkcija koje aproksimiraju δ -funkciju, u fizici se najčešće se koriste:

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}}, \quad (3.77)$$

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\sin \alpha x}{\pi \alpha x^2}. \quad (3.78)$$

Formula (3.76) u suštini zadaje δ -funkciju kao funkcional, odnosno element dualnog prostora (3.38), i u matematički strogoj formulaciji je definicija: često se uprošćeno ali u stvari precizno kaže da se δ -funkcija koristi samo "pod integralom". Dalje, dve uopštene funkcije $f(x)$

i $g(x)$ su jednake ako su jednake pod integralom, odnosno ako za svako $\psi(x)$ (iz potprostora probnih funkcija \mathcal{D}) važi jednakost

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)\psi(x) dx. \quad (3.79)$$

Koristeći ovu osobinu može se pokazati na primer da je

$$(x - a)\delta(x - a) = 0, \quad (3.80)$$

tj. da je rešenje svojstvene jednačine (3.69),

$$\psi_a(x) = \delta(x - a). \quad (3.81)$$

Pošto važi

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_a^*(x)\psi_b(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a)\delta(x - b) dx = \delta(b - a), \quad (3.82)$$

vidimo da su svojstvene funkcije koordinate za različite svojstvene vrednosti a i b ortogonalne. $\psi_a(x)$ se ne mogu normirati: vrednost kvadrata norme je beskonačna, a odgovarajuća stanja ne pripadaju Hilbert-ovom prostoru. Ovo je tipična osobina svojstvenih funkcija kontinualnog spektra, jer, da naglasimo, svojstvene vrednosti koordinate nisu ograničene nijednim uslovom već mogu uzimati proizvoljne vrednosti: spektar koordinate je cela realna osa, kao i u klasičnom slučaju. Činjenica da se $\psi_a(x)$ ne mogu normirati znači da ove funkcije ne predstavljaju prava fizička stanja i nemaju statističku interpretaciju: u prirodi ne postoje stanja u kojima čestica ima tačno određeni položaj. To nam govore i Heisenberg-ove relacije neodređenosti.

U Dirac-ovoj notaciji, svojstveni vektor koordinate za svojstvenu vrednost a označavamo sa $|a\rangle$. Analogno relaciji (3.203) važi

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} a|a\rangle\langle a| da = \int_{-\infty}^{+\infty} x|x\rangle\langle x| dx, \quad (3.83)$$

a sumiranje po svojstvenim vrednostima je u stvari integracija po parametru a (ili x) koji je kontinualan. Skup svojstvenih vektora je kompletan kao i u diskretnom slučaju (3.201),

$$\hat{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x| dx, \quad (3.84)$$

tako da za svako $|\psi\rangle$ imamo razvoj

$$|\psi\rangle = \hat{I}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\psi\rangle dx. \quad (3.85)$$

Koeficijenti u razvoju $\langle x|\psi\rangle$, su u stvari talasne funkcije u Schrödinger-ovoj reprezentaciji,

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x), \quad (3.86)$$

odnosno, talasna mehanika je koordinatna reprezentacija kvantne mehanike u kojoj su sve veličine zapisane u svojstvenom bazu operatora \hat{x} .

Slično možemo analizirati i svojstveni problem operatora impulsa. U koordinatnoj reprezentaciji svojstvena funkcija $\chi_k(x)$ koja odgovara svojstvenoj vrednosti $p = k\hbar$ je rešenje jednačine

$$-i\hbar \frac{d\chi_k}{dx} = \hbar k \chi_k. \quad (3.87)$$

Kao što smo već videli ova jednačina se lako rešava. Njena rešenja su ravni talasi

$$\chi_k(x) = C e^{ikx} = \langle x|k \rangle \quad (3.88)$$

i postoje za svaki realan broj k . Dakle, i spektar impulsa je cela realna osa. Ni ravni talasi nisu fizička stanja tj. imaju beskonačnu normu, ali su za različite vrednosti impulsa međusobno ortogonalni. Potpuno analogno sa (3.82) normiraju se na δ -funkciju,

$$\langle q|k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_q^*(x) \psi_k(x) dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(q-k)x} dx = \delta(q-k), \quad (3.89)$$

pa se za vrednost normalizacione konstante dobija $C = 1/\sqrt{2\pi}$. Ako ravne talase umesto na δ -funkciju po k normiramo na δ -funkciju po p , konstanta normiranja je $C' = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$. Slično relacijama (3.83-3.84) važi

$$\hat{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar k |k\rangle \langle k| dk, \quad \hat{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} |k\rangle \langle k| dk. \quad (3.90)$$

Stanja $|\psi\rangle$ možemo pisati i u impulsnoj reprezentaciji,

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |k\rangle \langle k|\psi\rangle dk = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) |k\rangle dk, \quad (3.91)$$

gde smo koeficijente razvoja označili sa $\tilde{\psi}(k) = \langle k|\psi\rangle$. Vezu između koordinatne i impulsne reprezentacije nije teško odrediti:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \langle x| \int_{-\infty}^{+\infty} dk |k\rangle \langle k|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \tilde{\psi}(k) dk, \quad (3.92)$$

to je Fourier-ova transformacija.

3.7 Kanonsko kvantovanje

Pošto smo definisali matematički okvir tj. kinematiku kvantne mehanike, treba da vidimo kako se klasičnom sistemu pridružuje kvantni, odnosno, kako se zadati klasični sistem kvantuje? Standardna procedura zove se *kanonsko kvantovanje* i bazira se na *principu korespondencije* koji je u stvari naredni princip kvantne mehanike.

Četvrti princip kvantovanja: KLASIČNI SISTEM KOJI OPISAN GENERALISANIM KOORDINATAMA x_i I KANONSKI KONJUGOVANIM IMPULSIMA p_i , TJ. VELIČINAMA ČIJA JE POISSON-OVA ZAGRADA

$$\{x_i, p_j\}_{\text{PZ}} = \delta_{ij}, \quad (3.93)$$

U KVANTNOJ MEHANICI SE OPISUJE OPERATORIMA \hat{x}_i I \hat{p}_i KOJI ZADOVOLJAVAJU HEISENBERG-OVE KOMUTACIONE RELACIJE

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}. \quad (3.94)$$

OSTALE FIZIČKE VELIČINE DOBIJAJU SE IZ ODGOVARAJUĆIH KLASIČNIH IZRAZA PRIMENOM IZABRANOG OPERATORSKOG UREĐENJA.

Ponekad se kolokvijalno kaže da je kvantovanje procedura u kojoj se klasičnim opservablama pridružuju operatori tako da Poisson-ova zagrada "prelazi" u komutator po sledećem pravilu

$$\{f, g\}_{PZ} \mapsto -\frac{i}{\hbar} [\hat{f}, \hat{g}]. \quad (3.95)$$

Ovaj iskaz zapravo nije sasvim tačan jer ne važi za sve funkcije f i g : može se pokazati da ne postoji preslikavanje

$$x \mapsto \hat{x}, \quad p \mapsto \hat{p}, \quad f(x, p) \mapsto \hat{f}(\hat{x}, \hat{p}), \quad (3.96)$$

za koje važi

$$\widehat{\{f, g\}_{PZ}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{f}, \hat{g}] \quad (3.97)$$

za proizvoljne funkcije kanonskih promenljivih¹⁵. Pokazaćemo međutim da se može nametnuti zahtev da jednakost (3.97) važi u vodećem redu po Planck-ovoj konstanti \hbar : zapravo, taj zahtev je jedan od osnovnih postulata tzv. *deformacione kvantizacije*.

Preslikavanje na neki način "obrnuto" kvantizaciji (3.96) je klasični limes $\hbar \rightarrow 0$ ¹⁶. Pokazaćemo da za proizvoljne funkcije \hat{f} i \hat{g} važi

$$[\hat{f}, \hat{g}] \mapsto i\hbar \{f, g\}_{PZ} + O(\hbar^2), \quad (3.98)$$

odnosno da klasični limes daje ne samo nulti red po \hbar (u kome sve veličine komutiraju), nego i prvi red u razvoju po \hbar . Smisao gornjeg iskaza vidi se preciznije kad se računaju komutatori. Na primer, iz relacije

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (3.99)$$

lako se pokazuje da je

$$[\hat{x}^n, \hat{p}] = i\hbar n x^{n-1}, \quad (3.100)$$

pa za proizvoljnu funkciju $\hat{f}(\hat{x})$ važi

$$[\hat{f}(\hat{x}), \hat{p}] = i\hbar \frac{d\hat{f}}{d\hat{x}}. \quad (3.101)$$

Slično, za funkciju $\hat{g}(\hat{p})$ koja zavisi samo od impulsa imamo

$$[\hat{x}, \hat{g}(\hat{p})] = i\hbar \frac{d\hat{g}}{d\hat{p}}. \quad (3.102)$$

Međutim ako funkcije \hat{f} i \hat{g} zavise od obe kanonske promenljive, onda razvoj u Taylor-ov red nije a priori dobro definisan i komutator $[\hat{f}, \hat{g}]$ ne može da se izračuna pre nego što se definiše operatorsko uređenje. Može ipak da se odredi vodeći doprinos tj. član linearan po \hbar ,

$$[\hat{f}, \hat{g}] = i\hbar \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{x}} \frac{\partial \hat{g}}{\partial \hat{p}} - \frac{\partial \hat{g}}{\partial \hat{x}} \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{p}} \right) + O(\hbar^2), \quad (3.103)$$

a rezultat je proporcionalan Poisson-ovoj zagradi.

¹⁵Nalaženje ovog preslikavanja u literaturi se naziva Dirac-ov problem, a njegova detaljnija diskusija može se naći npr. u Emch-ovoj knjizi koju smo citirali na početku ove glave.

¹⁶Preciznije, klasični limes kinematike. U dinamičkom smislu klasični limes dat je Ehrenfest-ovom teoremom koju navodimo u jednom od narednih poglavlja.

Računajući (3.103) vidimo da nejednoznačnost kvantovanja leži u operatorskom uređenju. U klasičnoj mehanici opservable komutiraju, pa njihov proizvod možemo da pišemo u bilo kom redosledu: u kvantnoj mehanici u principu $\hat{f}\hat{g} \neq \hat{g}\hat{f}$, pa moramo da definišemo redosled kojim se operatori množe. Konkretno: pretpostavimo npr. da u klasičnom hamiltonijanu imamo sabirak x^2p . Pitanje je, koji ćemo operator u kvantnoj mehanici pridružiti ovom članu: $\hat{x}^2\hat{p}$, $\hat{p}\hat{x}^2$, $\hat{x}\hat{p}\hat{x}$ ili nešto komplikovanije? Svi ovi izrazi su različiti a imaju isti klasični "avatar". Jedan od kriterijuma je jasan (ali nedovoljan): ako kvantujemo fizičku opservablu odgovarajući operator treba da bude hermitski, pa bismo u prethodnom primeru mogli da uzmemo npr. $\hat{x}\hat{p}\hat{x}$ ili $\frac{1}{2}(\hat{x}^2\hat{p} + \hat{p}\hat{x}^2)$ ali ne $\hat{x}^2\hat{p}$. U principu, odgovor na pitanje uređenja retko se zadaje aksiomatski. U praksi se problem uređenja skoro i ne postavlja i više je teorijske prirode: u kvantnoj teoriji polja sa druge strane najčešće se koristi tzv. normalno uređenje operatora.

Za razliku od teorije polja, mehanički sistemi odnosno sistemi sa konačnim brojem stepeni slobode imaju dobru osobinu da je njihovo kvantovanje jednoznačno. Ova osobina proističe iz Stone-von Neumann-ove teoreme koja kaže da je svaka unitarna ireducibilna reprezentacija Weyl-ove grupe ekvivalentna Schrödinger-ovoj reprezentaciji, u kojoj su generatori grupe dati sa

$$\hat{x} \rightarrow x, \quad \hat{p} \rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx}. \quad (3.104)$$

Weyl-ova grupa¹⁷ je dvoparametarska grupa koja se dobija eksponenciranjem koordinate i impulsa; njene jednoparametarske podgrupe su

$$\hat{U}(\sigma) = e^{-i\sigma\hat{p}}, \quad \hat{V}(\tau) = e^{-i\tau\hat{x}}. \quad (3.105)$$

U dokazu Stone-von Neumann-ove teoreme koristi se neprekidnost elemenata $\hat{U}(\sigma)$ i $\hat{V}(\tau)$ po parametrima σ i τ , a iz unitarnosti reprezentacije sledi da su generatori \hat{x} i \hat{p} hermitski operatori. Ovde, razume se, dokaz nećemo izvoditi, ali pošto se Weyl-ova grupa često koristi, zadržaćemo se malo na njenim osobinama i izvesti zakon množenja. Za računanje sa veličinama koje ne komutiraju, kao što su matrice ili operatori, jedna od najvažnijih jednakosti je Baker-Campbell-Hausdorff-ova formula

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (3.106)$$

Ova formula može da se dokaže uvođenjem funkcije $\hat{F}(s) = e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{-s\hat{A}}$ i njenim razvojem u Taylor-ov red po s . Mi ćemo (3.106) prvo primeniti da izračunamo izraz $\hat{U}^{-1}\hat{x}\hat{U}$. Pošto je $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$ a $[\hat{p}, [\hat{p}, \hat{x}]] = 0$, imamo

$$e^{i\sigma\hat{p}}\hat{x}e^{-i\sigma\hat{p}} = \hat{x} + \hbar\sigma. \quad (3.107)$$

Moženjem sa \hat{U} sleva, poslednja relacija može da se prepiše kao

$$[\hat{x}, \hat{U}(\sigma)] = \hbar\sigma\hat{U}(\sigma). \quad (3.108)$$

Sada može da se odredi i $\hat{V}^{-1}\hat{U}\hat{V}$. Korišćenjem (3.106) i (3.108) dobija se

$$\hat{V}^{-1}(\tau)\hat{U}(\sigma)\hat{V}(\tau) = e^{i\tau\sigma\hbar}\hat{U}(\sigma), \quad (3.109)$$

odnosno

$$\hat{U}(\sigma)\hat{V}(\tau) = e^{i\tau\sigma\hbar}\hat{V}(\tau)\hat{U}(\sigma), \quad (3.110)$$

ili, ako označimo $\hat{u} = \hat{U}(\sigma)$, $\hat{v} = \hat{V}(\tau)$ i $q = e^{i\tau\sigma\hbar}$,

$$\hat{u}\hat{v} = q\hat{v}\hat{u}. \quad (3.111)$$

¹⁷H. Weyl, The theory of groups and quantum mechanics, Dover Publications, 1931.

Poslednja relacija definiše *Weyl-ovu algebru*. Interesantno je da Weyl-ova algebra (3.111), za razliku od Heisenberg-ove algebre (3.99), za specijalne vrednosti konstante q koje su koreni jedinice, $q^n = 1$, ima konačnu n -dimenzionu reprezentaciju. Ona je data tzv. "clock" i "shift" matricama

$$\hat{v} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & q & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & q^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & q^{n-1} \end{pmatrix}, \quad \hat{u} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.112)$$

Razume se, izraze (3.112) ne možemo da rešimo po \hat{x} i \hat{p} i da time dobijemo konačnodimenzionu reprezentaciju Heisenberg-ove algebre jer logaritam nije dobro definisan.

Kanonska komutaciona relacija (3.99) je u nekom smislu srž kvantovanja (kanonskog kvantovanja; kvantovanje se, videćemo kasnije, može definisati i polazeći od simetrija) ali je, interpretirana geometrijski, vezana za trodimenzioni ravan prostor. Zato je prirodno da se pretpostavi da se u zakrivljenom prostoru ili na visokim energijama ona modifikuje. Jedna modifikacija koja sledi iz teorije struna data je sa

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar(1 + \beta\hat{p}^2), \quad (3.113)$$

gde je $\beta > 0$ dimenziona konstanta koja zadaje skalu energije na kojoj se odstupanja od standardne kvantne mehanike uočavaju. Pošto je relacija (3.113) dosta jednostavna a ima interesantne posledice, na njoj ćemo se malo zadržati. Jedna od posledica teorije u kojoj važi (3.113) je da se položaj ne može meriti sa proizvoljnom preciznošću. Ako napišemo za ovaj slučaj relacije neodređenosti,

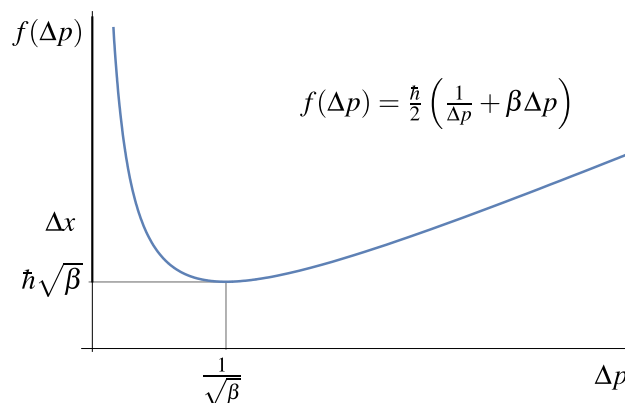
$$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle| = i\hbar(1 + \beta\langle\hat{p}^2\rangle) = i\hbar(1 + \beta(\Delta\hat{p})^2 + \beta\langle\hat{p}\rangle^2), \quad (3.114)$$

dobijamo

$$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} \geq \frac{\hbar}{2}(1 + \beta(\Delta\hat{p})^2), \quad (3.115)$$

odnosno

$$\Delta\hat{x} \geq \frac{\hbar}{2} \left(\frac{1}{\Delta\hat{p}} + \beta\Delta\hat{p} \right). \quad (3.116)$$



Slika 3.2: Neodređenost koordinate na osnovu modifikovanih relacija neodređenosti.

Iz grafika zavisnosti $\Delta\hat{x}(\Delta\hat{p})$ (slika 3.2) lako vidi se da neodređenost $\Delta\hat{x}$ ima minimalnu vrednost za $\Delta\hat{p} = 1/\sqrt{\beta}$, odnosno da je

$$\Delta\hat{x} \geq \hbar\sqrt{\beta}. \quad (3.117)$$

Ovakva osobina poželjna je na primer u kvantnoj gravitaciji, jer principijelna nemogućnost lokalizacije može da bude rešenje različitih problema singularnosti Einstein-ove gravitacije. Reprezentacija algebre (3.113) na prostoru kvadratno-integrabilnih funkcija data je u radu¹⁸ i sem gore navedene ima i druge interesantne osobine.

3.8 Dinamika kvantne mehanike

Do sada izloženi principi kvantovanja zadaju kinematiku kvantne mehanike, tj. njen matematički okvir: kao što smo videli neophodnost ovakvog opisa sledi iz eksperimenata. Slično, iz eksperimenata se dobija i dinamički zakon odnosno jednačina koja opisuje promenu stanja sistema sa vremenom. Mi smo doduše Schrödinger-ovu jednačinu i neka njena rešenja već upoznali, ali formulisaćemo je ovde ponovo i malo opštije, i zapisati u Dirac-ovoj notaciji.

Peti, dinamički postulat kvantne mehanike glasi: EVOLUCIJA STANJA FIZIČKOG SISTEMA OPIŠUJE SE SCHRÖDINGER-OVOM JEDNAČINOM,

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \quad (3.118)$$

\hat{H} JE HAMILTONIJAN SISTEMA KOJI SE DOBIJA KVANTOVANJEM KLASIČNOG HAMILTONIJANA H .

Pošto je jednačina (3.118) linearna i važi za sva stanja $|\Psi(t)\rangle$, ona se može formalno rešiti uvođenjem *operatora evolucije* $\hat{U}(t, t_0)$:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle \quad (3.119)$$

$\hat{U}(t, t_0)$ je unitaran operator jer su fizička stanja u svim trenucima normirana. U nastavku ćemo najčešće uzimati da je početni trenutak u nuli, $t_0 = 0$, i pisati $\hat{U}(t, 0) = \hat{U}(t)$. Iz Schrödinger-ove jednačine sledi da operator evolucije zadovoljava jednačinu

$$i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H}\hat{U}, \quad (3.120)$$

a početni uslov za $\hat{U}(t)$ je

$$\hat{U}(0) = \hat{I}. \quad (3.121)$$

U principu, rešavanje operatorske jednačine je, zbog nekomutativnosti množenja operatora, teži problem od rešavanja obične ili parcijalne diferencijalne jednačine. Ali u specijalnom slučaju konzervativnog sistema kada \hat{H} ne zavisi od vremena, (3.120) rešava se lako jer može da se pretpostavi da je \hat{U} funkcija samo od \hat{H} i vremena t koje je parametar. Tada iz

$$i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} \hat{U}^{-1} = i\hbar \frac{d \log \hat{U}}{dt} = \hat{H} \quad (3.122)$$

i pretpostavke da $\frac{d\hat{U}}{dt}$ komutira sa \hat{U} dobijamo

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}. \quad (3.123)$$

Naravno kao što znamo, svojstvena stanja hamiltonijana (koji ne zavisi od vremena) su stacionarna, jer ako je

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (3.124)$$

¹⁸A. Kempf, G. Mangano and R. B. Mann, *Hilbert space representation of the minimal length uncertainty relation*, Phys. Rev. D **52** (1995) 1108 [hep-th/9412167].

imamo i

$$|n(t)\rangle = \hat{U}(t)|n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle. \quad (3.125)$$

Međutim ako hamiltonijan zavisi eksplicitno od vremena, rešenje jednačine (3.120) u opštem slučaju ne može da se odredi: jednačina može da se reši samo formalno, i taj izraz se koristi kao osnova za razvoj teorije perturbacija u interakcionoj slici.

Iz (3.119) vidimo i kako mešano stanje sistema zavisi od vremena. Naime, ako je stanje u početnom trenutku opisano matricom gustine (3.46),

$$\hat{\rho}(0) = \sum_k w_k |\psi_k(0)\rangle \langle \psi_k(0)|, \quad (3.126)$$

u kasnijem trenutku t biće

$$\hat{\rho}(t) = \sum_k w_k |\psi_k(t)\rangle \langle \psi_k(t)| = \hat{U}(t) \hat{\rho}(0) \hat{U}^\dagger(t). \quad (3.127)$$

Jednačina koja opisuje promenu stanja sa vremenom

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = -[\hat{\rho}(t), \hat{H}] \quad (3.128)$$

je kvantni ekvivalent Liouville-ove jednačine klasične statističke fizike.

Sada ćemo formulirati još jednu vezu kvantne i klasične mehanike odnosno njen klasični limes: Ehrenfest-ovu teoremu. *Ehrenfest-ova teorema* daje zakon promene očekivane vrednosti opservable $\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$ sa vremenom, i dobićemo je diferenciranjem:

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle = \frac{d\langle \Psi(t) |}{dt} \hat{A} | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \hat{A} \frac{d| \Psi(t) \rangle}{dt}.$$

Drugi sabirak u poslednjem izrazu različit je od nule samo ako \hat{A} eksplicitno zavisi od vremena, npr. ako je veličina vezana za promenljivo spoljašnje polje. Sa druge strane, prvi i treći sabirak zamenjujemo iz Schrödinger-ove jednačine (3.118) i njoj adjungovane, pa dobijamo

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = i\hbar \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle + \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle. \quad (3.129)$$

To je Ehrenfest-ova teorema. Ona može da se uporedi sa osnovnom jednačinom kretanja klasične mehanike zapisanom u Hamilton-ovom formalizmu: vremenska promena proizvoljne klasične opservable A data je sa

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\}_{PZ}, \quad (3.130)$$

ponovo vidimo pravilo da pri kvantovanju Poisson-ova zagrada "prelazi" u komutator, odnosno $\{A, H\}_{PZ} \mapsto -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}]$. Ako za opservablu \hat{A} uzmemo koordinatu ili impuls, a za hamiltonijan $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x})$, dobijamo

$$\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}} \right\rangle = \left\langle \frac{\hat{p}}{m} \right\rangle, \quad (3.131)$$

$$\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle = -\left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}} \right\rangle. \quad (3.132)$$

Poslednje dve jednačine analogne su, opet, Hamilton-ovim jednačinama kretanja klasične mehanike za položaj i impuls ali naravno nisu identične jer za proizvoljnu funkciju F ,

$$F(\langle \hat{x} \rangle) \neq \langle F(\hat{x}) \rangle. \quad (3.133)$$

3.9 Schrödinger-ova i Heisenberg-ova slika

Opis kvantne mehanike koji koristimo, u kome talasna funkcija odnosno stanje sistema zavise od vremena a osnovne opservable ne zavise, naziva se *Schrödinger-ova slika*: ona je prirodno proistekla iz analogije "talasa materiješa elektromagnetnim odnosno klasičnim talasima, i bila je osnova intuicije Schrödinger-a, de Broglie-a i drugih. Ali talasna funkcija nije direktno merljiva fizička veličina već su to na primer gustina verovatnoće nalaženja čestice, $\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$ i očekivane vrednosti, recimo $\langle \hat{r}^2 \rangle = \int r^2 \rho(\vec{r}, t) dV$, koje su kvadratne po Ψ (ili kako se takođe kaže, bilinearne). Zbog toga sve funkcije $e^{i\chi(\vec{r}, t)}\Psi(\vec{r}, t)$ koje se od $\Psi(\vec{r}, t)$ razlikuju do na *fazni faktor* opisuju isto kvantno stanje kao i $\Psi(\vec{r}, t)$.

U stvari, rezultati merenja su ili svojstvene vrednosti opservabli ili verovatnoće njihovog nalaženja. Ove veličine se ne menjaju pri unitarnim transformacijama: jedna od takvih transformacija je vremenska evolucija. Sloboda koju daje linearna algebra, da se sve veličine unitarno transformišu, može se iskoristiti da se kvantnomehanički opis preformuliše i da se vremenska evolucija "prebaciša stanja na opservable. Naime, u Schrödinger-ovoj slici imamo

$$|\Psi(t)\rangle_S = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle_S, \quad \hat{A}_S(t) = \hat{A}_S(0). \quad (3.134)$$

Označimo početne vrednosti stanja i opservabli sa

$$|\Psi(0)\rangle_S = |\Psi\rangle, \quad \hat{A}_S(0) = \hat{A}. \quad (3.135)$$

Očekivana vrednost operatora \hat{A}_S u stanju $|\Psi_S\rangle$, izračunata u Schrödinger-ovoj slici je

$$\langle \hat{A}_S \rangle(t) = \langle \Psi(t) |_S \hat{A}_S | \Psi(t) \rangle_S = \langle \Psi | \hat{U}^{-1}(t) \hat{A} \hat{U}(t) | \Psi \rangle. \quad (3.136)$$

Naravno, ista očekivana vrednost se dobija kada sve veličine transformišemo unitarnim operatorom: izbor $\hat{U}^{-1}(t)$ daje *Heisenberg-ovu sliku*. Ona se definiše kao

$$|\Psi(t)\rangle_H = \hat{U}^{-1}(t)|\Psi(t)\rangle_S = |\Psi\rangle, \quad \hat{A}_H(t) = \hat{U}^{-1}(t)\hat{A}_S\hat{U}(t) = \hat{U}^{-1}(t)\hat{A}\hat{U}(t). \quad (3.137)$$

Vidimo da u Heisenberg-ovoj slici operatori zavise od vremena, a stanja ne. Za razliku od Schrödinger-ove slike u kojoj je, kao što znamo,

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle_S}{dt} = \hat{H}_S|\Psi(t)\rangle_S, \quad i\hbar \frac{d\hat{A}_S}{dt} = 0, \quad (3.138)$$

jednačine kretanja u Heisenberg-ovoj slici glase

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle_H}{dt} = 0, \quad i\hbar \frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)]. \quad (3.139)$$

Naravno početni uslov je i ovde

$$|\Psi(0)\rangle_H = |\Psi\rangle, \quad \hat{A}_H(0) = \hat{A} \quad (3.140)$$

jer je u trenutku $t = 0$, $\hat{U}(0) = \hat{I}$. Jednačina (3.139) je analogna Hamilton-ovoj formi klasičnog zakona kretanja i dobija se iz niza jednakosti

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} (\hat{U}^{-1} \hat{A}_S \hat{U}) &= i\hbar \left(\frac{d\hat{U}^{-1}}{dt} \hat{A}_S \hat{U} + \hat{U}^{-1} \hat{A}_S \frac{d\hat{U}^{-1}}{dt} \right) \\ &= -\hat{U}^{-1} \hat{H}_S \hat{U} \hat{U}^{-1} \hat{A}_S \hat{U} + \hat{U}^{-1} \hat{A}_S \hat{U} \hat{U}^{-1} \hat{H}_S \hat{U}. \end{aligned}$$

Naravno kada je sistem konzervativan, $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ pa je i

$$\hat{H}_S(t) = \hat{H}_H(t) = \hat{H}. \quad (3.141)$$

Treba obratiti pažnju na razliku u znaku u jednačinama (3.128) i (3.139): mada su jednačine koje opisuju evoluciju operatora slične, prva se odnosi na evoluciju stanja odnosno statističkog operatora i zapisana je u Schrödinger-ovoj slici, a druga na evoluciju opservable i data je u Heisenberg-ovoj slici.

U kvantnoj teoriji polja je veoma važna treća, *interakciona* ili *Dirac-ova slika*. Nju dobijamo kada ukupni hamiltonijan \hat{H} izrazimo kao zbir slobodnog hamiltonijana \hat{H}_0 i hamiltonijana interakcije \hat{H}' ,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'. \quad (3.142)$$

Po pravilu, $[\hat{H}_0, \hat{H}'] \neq 0$. Iz Schrödinger-ove slike u Dirac-ovu prelazi se operatorom $\hat{U}_0(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$:

$$|\Psi(t)\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} |\Psi(t)\rangle_S = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\Psi\rangle, \quad \hat{A}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \hat{A}_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}. \quad (3.143)$$

Očigledno, u interakcionoj slici i stanja i opservable zavise od vremena. Diferenciranjem jednačine (3.143) dobijamo odgovarajuće zakone promene:

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle_I}{dt} = \hat{H}'_I(t) |\Psi(t)\rangle_I, \quad i\hbar \frac{d\hat{A}_I(t)}{dt} = [\hat{A}_I(t), \hat{H}_{0,I}(t)]. \quad (3.144)$$

Stanja evoluiraju po interakcionom delu hamiltonijana, a opservable po slobodnom. Ovo je u kvantnoj teoriji polja veoma važno jer omogućava da se, u interakcionoj slici, interagujuća polja kvantuju na isti način kao slobodna polja, korišćenjem kanonskih komutacionih relacija.

3.10 Operatori kreacije i anihilacije

Ovu glavu završićemo tako što ćemo ponovo rešiti svojstveni problem harmonijskog oscilatora ali algebarski, uvodeći operatore kreacije i anihilacije. Ovaj metod je jedan od najvažnijih kvantnomehaničkih metoda: konstrukcija prostora stanja iz vakuuma delovanjem operatora kreacije (Fock-ovog prostora) primenjuje se i na kvantovanje polja ali i u teoriji reprezentacija Lie-jevih algebri.

Svojstveni problem hamiltonijana harmonijskog oscilatora

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 \quad (3.145)$$

može se rešiti analizom relacija u algebri koju generišu \hat{x} , \hat{p} i \hat{H} . Uvedimo (bezdimenzioni) *operator anihilacije*

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p} = \hat{\xi} + i\hat{\eta}. \quad (3.146)$$

Operator \hat{a} očigledno nije hermitski; njegov adjungovani \hat{a}^\dagger zove se *operator kreacije*,

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p} = \hat{\xi} - i\hat{\eta}. \quad (3.147)$$

Njihov proizvod, *operator broja čestica*

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}, \quad (3.148)$$

je hermitski i nenegativan operator. Lako se proverava da važi komutaciona relacija

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad (3.149)$$

kao i

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger. \quad (3.150)$$

Sem toga, hamiltonijan harmonijskog oscilatora može da se izrazi preko \hat{a} i \hat{a}^\dagger :

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \omega (\hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a}) = \hbar \omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right), \quad (3.151)$$

tako da je rešavanje svojstvenog problema od \hat{H} ekvivalentno nalaženju svojstvenih stanja i svojstvenih vrednosti od \hat{N} .

Označimo svojstvene vektore operatora \hat{N} sa $|n\rangle$,

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \langle n|n\rangle = 1. \quad (3.152)$$

Oznaka sugerise da su sve svojstvene vrednosti od \hat{N} diskretne, ali zapravo ono što ćemo pretpostaviti (i što je dovoljno da se pretpostavi) je znatno manje: da \hat{N} ima jedno svojstveno stanje koje se može normirati, tj. jedan vektor iz diskretnog spektra. Pošto je \hat{N} nenegativan operator, njegove svojstvene vrednosti n su pozitivne ili nula (ali ne nužno celobrojne).

Za algebarsku konstrukciju ključna je sledeća opservacija: pored $|n\rangle$, i vektor $|\varphi\rangle = \hat{a}^\dagger |n\rangle$ je svojstveni vektor od \hat{N} . To se vidi iz sledećeg niza jednakosti

$$\hat{N}|\varphi\rangle = \hat{N}\hat{a}^\dagger |n\rangle = \hat{a}^\dagger (\hat{N} + 1)|n\rangle = (n + 1)|\varphi\rangle, \quad (3.153)$$

iz koga sledi da je $|\varphi\rangle$ svojstveni vektor za svojstvenu vrednost $n + 1$,

$$|\varphi\rangle = c|n + 1\rangle. \quad (3.154)$$

Delovanje operatora kreacije može da promeni dužinu vektora i zato smo u (3.154) napisali koeficijent proporcionalnosti c , jer je vektor $|n + 1\rangle$ po definiciji normiran. Kvadrat dužine vektora $|\varphi\rangle$ dat je sa

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = \langle n | \hat{a} \hat{a}^\dagger | n \rangle = \langle n | (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) | n \rangle = n + 1. \quad (3.155)$$

Odavde vidimo da je $c = \sqrt{n + 1}$, tako da imamo

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n + 1} |n + 1\rangle. \quad (3.156)$$

Slično se može pokazati da operator anihilacije deluje kao

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n} |n - 1\rangle. \quad (3.157)$$

Operator kreacije \hat{a}^\dagger podiže svojstvenu vrednost od \hat{N} za jedan, a operator anihilacije \hat{a} je smanjuje za jedan. Prema tome, važi i

$$\hat{a}^k |n\rangle = \sqrt{\frac{n!}{(n - k)!}} |n - k\rangle, \quad (3.158)$$

$$\hat{a}^{\dagger k} |n\rangle = \sqrt{\frac{(n + k)!}{n!}} |n + k\rangle. \quad (3.159)$$

Da sumiramo: navedenom konstrukcijom smo iz fiksiranog svojstvenog vektora $|n\rangle$ dobili niz svojstvenih vektora $|n + k\rangle$, $|n - k\rangle$, za svaki ceo broj k . Ali, to znači da spektar sadrži i negativne svojstvene vrednosti, jer k može biti proizvoljno veliko! Drugim rečima konstrukcija

je kontradiktorna, jer zbog pozitivnosti operatora \hat{N} (i pozitivnosti skalarnog proizvoda) sve njegove svojstvene vrednosti moraju biti nenegativne. Kontradikcija se može izbeći samo u jednom slučaju: kada se među svojstvenim vrednostima nalazi nula. Tada delovanje operatora anihilacije daje

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \quad (3.160)$$

jer je dužina vektora na desnoj strani $\sqrt{0} = 0$, i time se niz svojstvenih stanja ispod nule prekida. Ako bismo krenuli od necelog broja, na primer $n = 0.2$, ne bismo dobili "odsecanje" niza jer je (3.157) tada $\hat{a}|0.2\rangle = \sqrt{0.2}|-0.8\rangle$, odnosno dobijamo svojstveni vektor za negativnu svojstvenu vrednost. Dakle, navedeno rešenje je konzistentno samo kada je skup svojstvenih vektora $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots\}$, a svojstvene vrednosti od \hat{N} su celi pozitivni brojevi ili 0. Zahtev pozitivnosti \hat{N} u ovom izvođenju je ekvivalentan zahtevu normalizabilnosti rešenja u analitičkom pristupu problemu.

Istovremeno smo dobili i spektar energije harmonijskog oscilatora,

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.161)$$

Stanje najniže energije $E_0 = \hbar\omega/2$ koje se karakteriše sa

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \quad (3.162)$$

naziva se *vakuum*. Talasna funkcija ovog stanja, $\langle x|0\rangle = \psi_0(x)$, može da se odredi iz uslova (3.162),

$$\hat{a}\psi_0 = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p} \right) \psi_0(x) = 0. \quad (3.163)$$

Rešenje ove jednačine je Gauss-ov talasni paket (2.27). Iz talasne funkcije osnovnog stanja delovanjem operatora \hat{a}^\dagger mogu da se dobiju talasne funkcije svih pobuđenih stanja harmonijskog oscilatora.

Mada operator anihilacije \hat{a} nije hermitski, njegova svojstvena jednačina

$$\hat{a}|z\rangle = (\hat{\xi} + i\hat{\eta})|z\rangle = z|z\rangle, \quad (3.164)$$

ima rešenje za proizvoljno kompleksno z : ta rešenja nazivaju se *koherentna stanja* i, lako je proveriti, i ona su Gauss-ovi paketi:

$$\langle x|z\rangle = c \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}zx\right) = c e^{-\xi^2 + 2\xi z}. \quad (3.165)$$

Konstanta normiranja c je

$$|c|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{(z+z^*)^2}{2}\right). \quad (3.166)$$

Možda najvažnija osobina koherentnih stanja je da su ona škoro klasična", tj. u ovim stanjima proizvod neodređenosti je minimalan, $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} = \hbar/2$. Ona dele ravan (ξ, η) na ćelije površine $\hbar/2$: ova podela faznog prostora je fleksibilna a ne kruta kao kod kristalne rešetke, i zato, za razliku od rešetke, možemo da reprezentujemo grupu translacija (zapravo celu Weyl-ovu grupu). Svojstveni bazis od \hat{a} , $\{|z\rangle\}$, je normiran ali kontinualan: razume se, stanja nisu međusobno ortogonalna. Važna osobina skupa koherentnih stanja je da ona čine "prekompletan" bazis (na engleskom, "overcomplete"), tj. da do na faktor daju razlaganje jedinice

$$I = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \int dz dz^* |z\rangle\langle z|. \quad (3.167)$$

Druga važna formula koju ćemo navesti je razvoj koherentnog stanja $|z\rangle$ po svojstvenom bazisu energije $\{|n\rangle\}$:

$$|z\rangle = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (3.168)$$

3.11 Dodatak

Vektorski prostor

LINEARNI ILI VEKTORSKI PROSTOR \mathcal{H} nad poljem skalara \mathbb{F} , brojeva $a, b, \dots \in \mathbb{F}$, je skup vektora $\psi, \chi, \phi \dots \in \mathcal{H}$ na kome su definisane dve operacije, sabiranje vektora i množenje skalarom. U odnosu na ove operacije \mathcal{H} je zatvoren i važi

$$\text{asocijativnost, } \phi + (\psi + \chi) = (\phi + \psi) + \chi \quad (3.169)$$

$$\text{komutativnost, } \phi + \psi = \psi + \phi \quad (3.170)$$

$$\text{postoji nula, } 0 \in \mathcal{H}: 0 + \psi = \psi \quad (3.171)$$

$$\text{postoji inverz, } -\psi \in \mathcal{H}: \psi + (-\psi) = 0 \quad (3.172)$$

$$\text{distributivnost, } a(\psi + \phi) = a\psi + a\phi \quad (3.173)$$

$$\text{distributivnost, } (a + b)\psi = a\psi + b\psi \quad (3.174)$$

$$\text{kompatibilnost, } a(b\psi) = (ab)\psi \quad (3.175)$$

$$\text{kompatibilnost, } 1\psi = \psi. \quad (3.176)$$

SKALARNI PROIZVOD je operacija koja vektorima ψ i ϕ pridružuje broj (ψ, ϕ) , i ima sledeće osobine:

$$(\phi, a\psi) = a(\phi, \psi) \quad (3.177)$$

$$(\phi, \psi) = (\psi, \phi)^* \quad (3.178)$$

$$(\psi, \psi) \geq 0; \text{ ako je } (\psi, \psi) = 0, \text{ onda je } \psi = 0. \quad (3.179)$$

Vektorski prostor sa skalarnim proizvodom naziva se unitarni prostor. U njemu se može definisati dužina ili norma vektora, $|\psi|$,

$$|\psi| = \sqrt{(\psi, \psi)}, \quad (3.180)$$

kao i ugao koji zaklapaju dva vektora, $\angle\psi\phi$: $\cos(\angle\psi\phi) = (\psi, \phi) / (|\psi||\phi|)$. Za vektore za koje je $(\psi, \phi) = 0$ kažemo da su ortogonalni. Dalje, važi Cauchy-Schwarz-ova¹⁹ nejednakost:

$$(\psi, \psi)(\phi, \phi) \geq |(\psi, \phi)|^2. \quad (3.181)$$

Jedna od osnovnih karakteristika vektorskog prostora je njegova dimenzija. Dimenzija je najmanji broj linearno nezavisnih vektora $e_i \in \mathcal{H}$ takav da se proizvoljan vektor prostora \mathcal{H} može izraziti kao njihova linearna kombinacija:

$$\psi = \sum_i c_i e_i. \quad (3.182)$$

Skup $\{e_i\}$ zove se bazis, a koeficijenti c_i , koeficijenti u razvoju po bazisu.

Svaki kompleksni vektorski prostor dimenzije m ekvivalentan je prostoru brojnih kolona \mathbb{C}^m ,

$$\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_m \end{pmatrix}, \quad (3.183)$$

¹⁹Ili pravilnije, nejednakost Cauchy-Schwarz-Bunyakovskog.

$c_i, c'_i \in \mathbb{C}$, $i = 1, \dots, m$. Skalarni proizvod je definisan sa

$$(\psi, \phi) = \psi^\dagger \phi = \sum_{i=1}^m c_i^* c'_i. \quad (3.184)$$

I prostor (kompleksnih) nizova je vektorski prostor, a njegove elemente možemo zapisati kao

$$\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_m \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (3.185)$$

Skalarni proizvod dat je sa

$$(\psi, \phi) = \psi^\dagger \phi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i^* c'_i. \quad (3.186)$$

Prostor nizova konačne norme označava se sa ℓ_2 .

Kompleksne funkcije $\psi(x)$ realne promenljive x čine vektorski prostor. Skalarni proizvod u tom prostoru zadaje se pomoću integrala:

$$(\psi, \phi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \phi(x) dx. \quad (3.187)$$

Funkcije čija je norma definisana proizvodom (3.187) konačna, nazivaju se kvadratno-integrabilne funkcije, a prostor tih funkcija označava se sa L_2 . Skalarni proizvod može biti zadat i nekom drugom formulom, na primer

$$(\psi, \phi) = \int_a^b \mu(x) \psi^*(x) \phi(x) dx, \quad (3.188)$$

gde je $\mu(x)$ pozitivna funkcija koja se naziva mera. Prostor L_2 je beskonačnodimenzion: najjednostavniji način da se to vidi je razvoj funkcije u Taylor-ov red,

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi^{(n)}(0)}{n!} x^n, \quad (3.189)$$

jer su monomi x^n linearno nezavisni²⁰. Drugi bazis po kome talasna funkcija $\psi(x)$ može da se razloži je bazis ravnih talasa, i to razlaganje je razvoj u Fourier-ov integral,

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k) e^{ikx} dk. \quad (3.190)$$

Ravnih talasa ima neprebrojivo mnogo: k menja kontinualno, $k \in (-\infty, +\infty)$.

²⁰Ako su funkcije $f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x)$ linearno zavisne, njihov vronskijan $W(f_1, \dots, f_n) =$

$$\begin{pmatrix} f_1 & f_2 & \dots & f_n \\ f_1' & f_2' & \dots & f_n' \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ f_1^{(n-1)} & f_2^{(n-1)} & \dots & f_n^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

je nula za svako x , tj. ako je $W(f_1, \dots, f_n) \neq 0$, funkcije su linearno nezavisne.

Linearni operatori

LINEARNI OPERATOR A je preslikavanje linearnog prostora \mathcal{H} u samog sebe,

$$A\psi = \phi, \quad \psi, \phi \in \mathcal{H}, \quad (3.191)$$

koje je linearno

$$A(a\psi + b\chi) = aA\psi + bA\chi, \quad a, b \in \mathbb{F}. \quad (3.192)$$

Skup svih operatora koji deluju u \mathcal{H} je algebra, struktura zatvorena u odnosu na sabiranje i množenje. Množenje u algebri operatora je njihovo uzastopno delovanje,

$$(AB)\psi = A(B\psi), \quad (3.193)$$

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

$$[A, B] = AB - BA \quad (3.194)$$

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

$$A^0 = I, \quad A^2 = AA, \quad A^3 = A^2A, \dots \quad (3.195)$$

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

$$f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} A^k. \quad (3.196)$$

Operator A^\dagger je ADJUNGOVANI operator od A ako za sve vektore ψ koji su u domenu od A i χ važi

$$\langle \chi, A\psi \rangle = \langle A^\dagger \chi, \psi \rangle = \langle \chi | A | \psi \rangle. \quad (3.197)$$

U odnosu na adjungovanje definišu se različite klase operatora. Hermitski operatori su oni za koje je $H^\dagger = H$, kod antihermitskih je $A^\dagger = -A$, a kod unitarnih, $U^\dagger = U^{-1}$. Svi ovi operatori su normalni, odnosno zadovoljavaju uslov $AA^\dagger = A^\dagger A$. Lako se proverava da su očekivane vrednosti $\langle \psi | A | \psi \rangle$ hermitskog operatora realni, a antihermitskog operatora imaginarni brojevi.

Nekoliko važnih pojmova u kvantnoj mehanici vezano je za svojstvenu jednačinu. Brojevi λ_a za koje jednačina

$$A\psi_a = \lambda_a\psi_a \quad (3.198)$$

ima rešenje zovu se svojstvene vrednosti, dok su ψ_a , ili u Dirac-ovoj notaciji, $|a\rangle$, odgovarajući svojstveni vektori operatora A . Skup svih svojstvenih vrednosti $\{\lambda_a\}$ je SPEKTAR operatora A . Neke od svojstvenih vrednosti λ_a mogu da budu međusobno jednake (degenerisane): tada se uvodi dodatni kvantni broj, oznaka koja ih razlikuje,

$$A|a, v\rangle = \lambda_a|a, v\rangle. \quad (3.199)$$

U m -dimenzionom vektorskom prostoru \mathbb{C}^m linearni operatori su $m \times m$ matrice,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mm} \end{pmatrix}, \quad (3.200)$$

$a_{ij} \in \mathbb{C}$. Domen svakog operatora je ceo prostor \mathbb{C}^m , a rešavanje svojstvenog problema je dijagonalizacija matrice: spektar operatora je uvek diskretan pa je a iz (3.198) iz skupa prirodnih brojeva. Važna osobina normalnih matrica je da se mogu dijagonalizovati a skup njihovih svojstvenih vektora je ortonormirani bazis:

$$\langle n, \nu | k, \kappa \rangle = \delta_{nk} \delta_{\nu\kappa}, \quad I = \sum_{n, \nu} |n, \nu\rangle \langle n, \nu|. \quad (3.201)$$

Poslednja relacija zove se relacija kompletnosti. Projektori

$$P_n = \sum_{\nu} |n, \nu\rangle \langle n, \nu| \quad (3.202)$$

su svojstveni projektori na potprostor određen svojstvenom vrednošću λ_n . Operator se u svojstvenom bazisu zapisuje kao

$$A = \sum_{n, \nu} a_n |n, \nu\rangle \langle n, \nu| = \sum_n a_n P_n. \quad (3.203)$$

Izbor bazisa koji je svojstveni za opservablu A i reprezentovanje svih stanja i opservabli u tom bazisu zove se A -reprezentacija.

U prostoru funkcija L_2 linearni operator je svako linearno preslikavanje, na primer $\psi(x) \rightarrow x\psi(x)$, $\psi(x) \rightarrow \psi(x-a)$. Operator diferenciranja reprezentuje u kvantnoj mehanici impuls,

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}. \quad (3.204)$$

\hat{p} je hermitski, što se može proveriti parcijalnom integracijom

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x) (\hat{p}\psi(x)) dx &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx = \\ &= -i\hbar \chi^*(x)\psi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} + i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\chi^*(x)}{dx} \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{p}^\dagger \chi(x))^* \psi(x) dx, \end{aligned} \quad (3.205)$$

a granični član otpada zbog kvadratne integrabilnosti funkcija $\chi(x)$ i $\psi(x)$. Impuls je neograničen operator i nema diskretan nego neprekidni spektar, a njegove svojstvene funkcije nisu kvadratno-integrabilne. U opštem slučaju, u beskonačnodomenzionalnom prostoru deo spektra hermitskog operatora može biti diskretan a deo kontinualan. Važi uopštenje razlaganja (3.203), ne sasvim precizno zapisano kao

$$A = \sum_n a_n |n\rangle \langle n| + \int a |a\rangle \langle a| da. \quad (3.206)$$

Svojstveni vektori kontinualnog spektra se mogu normirati na δ -funkciju,

$$\langle a|b\rangle = \delta(a-b). \quad (3.207)$$

3.12 Zadaci

3.1 Posmatrajmo realne neprekidne funkcije definisane na konačnom intervalu (α, β) kao vektore (označimo ove funkcije sa $f(x)$ i $g(x)$). Definišimo skalarni proizvod vektora kao

$$(f, g) = \int_{\alpha}^{\beta} f(x)g(x)dx.$$

- a) Pokazati da ova definicija skalarnog proizvoda zadovoljava uslove (3.177-3.179).
- b) Napisati Schwartz-ovu nejednakost preko ovog skalarnog proizvoda, a onda je dokazati.

3.2 Pokazati da je

- a) $(AB)^{\dagger} = B^{\dagger}A^{\dagger}$;
- b) $((A^{\dagger})^{\dagger}) = A$;

3.3 Ispitati da li su sledeći operatori hermitski ili antihermitski:

- a) $A + A^{\dagger}$,
- b) AA^{\dagger} ,
- c) $[A, A^{\dagger}]$,
- d) $[A, B]$ gde su A i B hermitski operatori.

3.4 Dokazati sledeće osobine hermitskih operatora:

- a) svojstvene vrednosti hermitskih operatora su realni brojevi;
- b) svojstvena stanja koja odgovaraju različitim svojstvenim vrednostima hermitskog operatora su međusobno ortogonalna.

3.5 Ako je A hermitski operator, pokazati da za proizvoljno stanje $|\psi\rangle$ važi

- a) Očekivana veličina $\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | A | \psi \rangle$ je realan broj.
- b) Za vektor $A|\psi\rangle$ važi

$$A|\psi\rangle = \langle A \rangle_{|\psi\rangle} |\psi\rangle + (\Delta A)_{|\psi\rangle} |\phi\rangle,$$

gde su $|\phi\rangle$ jedinični vektor ortogonalan na $|\psi\rangle$, $\langle A \rangle_{|\psi\rangle}$ i $(\Delta A)_{|\psi\rangle}$ očekivana vrednost i disperzija operatora A u stanju $|\psi\rangle$.

3.6 Polazeći od klasične veličine xp_x , konstruisati hermitski operator, odnosno naći odgovarajuću opservablu.

3.7 Rešiti svojstveni problem matrice

$$A = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

Ako su $|e_k\rangle$ normirani svojstveni vektori i λ_k odgovarajuće svojstvene vrednosti ($k = 1, 2, 3$) pokazati na ovom primeru da je

$$\sum_{k=1}^3 |e_k\rangle\langle e_k| = I, \quad \sum_{k=1}^3 \lambda_k |e_k\rangle\langle e_k| = A.$$

3.8* Razmotrimo proizvoljnu 2×2 matricu A .

a) Naći karakteristični polinom za ovu matricu

$$p(\lambda) = \det(A - \lambda I),$$

gde je I je jedinična matrica.

b) Pokazati da je $p(A) = 0$ pri čemu je 0 nulta matrica. Ovo je posledica Cayley–Hamilton-ove teoreme, koja tvrdi da je iskaz tačan za proizvoljnu $n \times n$ matricu.

c) Na osnovu prethodnog dela zadatka, pokazati da za 2×2 matrice važi

$$A^2 = A \operatorname{tr}(A) - I \det(A).$$

3.9 Razmotrimo prostor kvadratnih funkcija na intervalu $(-1, 1)$ sa skalarnim proizvodom

$$(p, q) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 p(x)q(x)dx.$$

U ovom prostoru jedan bazis je $\{1, x, x^2\}$. Koristeći Gram-Schmidt-ovu proceduru, izvršiti ortonormiranje ovog bazisa.

3.10 Pokazati da je $\hat{U}_a \psi(x) = \psi(x + a)$ unitaran operator. Skalarni proizvod je

$$(\chi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x)\psi(x)dx.$$

3.11 Neka su $u(x)$ i $v(x)$ realne funkcije definisane na konačnom intervalu (a, b) , dva puta diferencijabilne i jednake nuli na krajevima intervala. Skalarni proizvod je zadat sa

$$(u, v) = \int_a^b u(x)v(x)dx.$$

a) Pokazati da je Sturm-Liouville-ov operator

$$\mathcal{L}u(x) = \frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{du(x)}{dx} \right) + q(x)u(x),$$

hermitski operator. Ovde su $p(x)$ i $q(x)$ proizvoljne funkcije.

b) Pokazati da je Sturm-Liouville-ova jednačina

$$\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{du}{dx} \right) + (\lambda - q(x))u = 0,$$

svojtveni problem hermitskog operatora.

3.12 Data je matrica

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Pokazati da je

$$e^{iA\alpha} = f(\alpha)I + g(\alpha)A$$

gde su $f(\alpha)$ i $g(\alpha)$ funkcije koje treba odrediti.

3.13 Naći koren, prirodni logaritam i sinus matrice

$$M = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 3 \\ 0 & -3 & 0 \\ 3 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

3.14 Neka je $\beta(V) = \{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ ortonormirani bazis u prostoru stanja neke čestice. Opservabla A je definisana delovanjem na bazisne vektore

$$A|1\rangle = 2|1\rangle + |2\rangle, \quad A|2\rangle = |1\rangle + 2|2\rangle, \quad A|3\rangle = 4|3\rangle.$$

Odrediti svojstvena stanja i svojstvene vrednosti ove opservable.

3.15 Hamiltonijan nekog sistema koji ima četiri moguća stanja opisan je matricom

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 7/2 & i/2 \\ 0 & 0 & -i/2 & 7/2 \end{pmatrix}.$$

U početnom trenutku sistem je u stanju

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 3-i \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Odrediti dalju evoluciju sistema i naći vreme posle koga se sistem vrati u početno stanje.

3.16 U prostoru stanja V sa bazisom $\beta(V) = \{|1\rangle, |2\rangle\}$ zadata su tri operatora A , B i C

$$A = 22a|1\rangle\langle 1| - 6ia|2\rangle\langle 1| + 6ia|1\rangle\langle 2| + 13a|2\rangle\langle 2|,$$

$$B = 11b|1\rangle\langle 1| - 8ib|2\rangle\langle 1| + 8ib|1\rangle\langle 2| - b|2\rangle\langle 2|,$$

$$C = 9c|1\rangle\langle 1| + 3ic|2\rangle\langle 1| - 3ic|1\rangle\langle 2| + c|2\rangle\langle 2|.$$

- Odrediti opservablu koja je kompatibilna sa A .
- Ako je merena opservabla A i dobijen rezultat $10a$, odrediti stanje u kome se čestica nalazi posle merenja.
- Šta može da se očekuje kao rezultat merenja ako se potom meri opservabla B ?
- Ukoliko se nakon merenja opservable A opisanog u delu **b)** izmeri opservabla C odrediti moguće rezultate.

3.17 Hamiltonijan H ima dva normirana svojstvena stanja $|\psi_1\rangle$ i $|\psi_2\rangle$, kojima odgovaraju energije E_1 i E_2 .

- Pokazati da su stanja $|\psi_1\rangle$ i $|\psi_2\rangle$ međusobno ortogonalna.
- Ako je A nova opservabla koja prebacuje jedno stanje u drugo:

$$A|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle \quad \text{i} \quad A|\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle,$$

odrediti svojstvena stanja opservable A .

c) Ukoliko se sistem u početnom trenutku nalazi u stanju

$$|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle)$$

odrediti dalju evoluciju sistema a potom naći verovatnoću da se u trenutku t sistem nađe u početnom stanju.

3.18 Vremenski nezavisani hamiltonijan H ima nedegenerisani spektar E_v :

$$H|v\rangle = E_v|v\rangle.$$

Neka je opservabla A definisana u istom Hilbertovom prostoru stanja i neka je njen spektar takođe nedegenerisan:

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle.$$

Na ovom sistemu najpre je izvršeno merenje energije i dobijena je vrednost E_v .

- a) Naći očekivanu vrednost od A i verovatnoća da se prilikom merenja opservable A dobije rezultat a_m ?
- b) Ako je nakon merenja opservable A dobijen rezultat a_m , kolika je verovatnoća da će se nakon vremena t dobiti opet isti rezultat a_m ?

3.19* Heisenberg-ova algebra $[x, p] = i$, odnosno $[a, a^\dagger] = 1$ (stavili smo ovde da je $\hbar = 1$, $m, \omega = 1$) često se preciznije zapisuje kao

$$[x, p] = iX, \quad [x, X] = 0, \quad [p, X] = 0.$$

Pokazati da ova Lie-jeva algebra ima konačnodimenzionu reprezentaciju pomoću gornjih trogaonih matrica

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad p = \frac{1}{\sqrt{2}i} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ovo nije i reprezentacija cele algebre koordinata i impulsa odnosno Weyl-ove grupe, jer X nije jedinica: $X^2 = 0$, $X \neq I$.

3.20* Jedna od reprezentacija kinematičkog prostora stanja kvantne gravitacije na petljama (na engleskom, "loop quantum gravity") koja se koristi u "loop-kvantnoj kosmologiji" je prostor kvadratno-integrabilnih funkcija na Bohr-ovoj kompakfikaciji realne ose²¹. Ova kompakfikacija zadata je skalarnim proizvodom

$$\langle \psi | \phi \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \int_{-L}^L \psi^*(x) \phi(x) dx.$$

Pokazati da su za ovakav skalarni proizvod ravni talasi ortonormirani, $\langle p_i | p_j \rangle = \delta_{ij}$. Pošto ravnih talasa ima kontinualno mnogo a normirani su, prostor nije separabilan.

3.21* Odrediti indekse defekta za operator diferenciranja, $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$, koji deluje na prostoru kvadratno-integrabilnih funkcija definisanih na intervalu

²¹Po Harald Bohr-u; pogledati npr. u radu A. Ashtekar, S. Fairhurst and J. L. Willis, *Quantum gravity, shadow states, and quantum mechanics*, Class. Quant. Grav. **20** (2003) 1031 [gr-qc/0207106].

- a)** $(-\infty, \infty)$, **b)** $(0, 2\pi)$, **c)** $(0, \infty)$.

3.22 Pokazati da za δ -funkciju važi:

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

b) $\delta(-x) = \delta(x),$

c) $\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x)f(x)dx = -f'(0),$

d) $\delta'(-x) = -\delta'(x),$

e) $x\delta'(x) = -\delta(x),$

f) $\delta(bx) = \frac{\delta(x)}{|b|},$

g) $\theta'(x-a) = \delta(x-a)$, gde je $\theta(x-a) = \begin{cases} 1, & x > a \\ 0, & x < a \end{cases}$,

h) $\int_b^c \delta(x-a)dx = \theta(c-a)\theta(a-b).$

3.23 Pokazati da se definiciona formula za δ -funkciju svodi na razlaganje jedinice:

$$\langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|y\rangle \langle y|\psi\rangle dy.$$

3.24 Pokazati da su

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}},$$

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

aproksimacije δ -funkcije, tj. da za njih važe osobine analogne (3.71), (3.6) i (3.76).

3.25 Izračunati integrale

a) $\int_{-1}^1 \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right)\delta(x)dx,$

b) $\int_{-2}^3 (|x| + e^x)\delta(x+1)dx,$

c) $\int_0^{\infty} \sin^7(\pi x)\delta(2x+1)dx,$

d) $\int_1^9 \frac{e^x}{\sqrt{1+x^2}}\delta(x)dx.$

3.26 Neka su A, B i C linearni operatori, a a i b brojevi. Dokazati da komutator linearnih operatora definisan sa $[A, B] = AB - BA$ ima sledeće osobine:

a) $[A, B] = -[B, A];$

- b) $[aA + bB, C] = a[A, C] + b[B, C]$;
 c) $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$;
 d) $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$ (Jacobi-jev identitet).

3.27* Pokazati da su verne reprezentacije Heisenberg-ove algebre

a) u prostoru 3×3 matrica:

$$S(x) = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S(p) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S(C) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

b) u prostoru diferencijabilnih funkcija $f(x, p, C)$

$$\rho(x) = i \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{2} p \frac{\partial}{\partial C} \right), \quad \rho(p) = i \left(\frac{\partial}{\partial p} + \frac{1}{2} x \frac{\partial}{\partial C} \right), \quad \rho(C) = i \frac{\partial}{\partial C}.$$

Uzeti da je $\hbar = 1$.

3.28 Za česticu koja se nalazi između beskonačnih zidova n -to svojstveno stanje u koordinatnoj reprezentaciji je

$$\langle x|n\rangle = \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}.$$

- a) Naći kako izgleda to stanje u impulsnoj reprezentaciji.
 b) Odrediti gustinu verovatnoće impulsa u osnovnom $|\tilde{\psi}_1(k)|^2$ i prvom pobuđenom $|\tilde{\psi}_2(k)|^2$ stanju.
 c) Izračunati očekivanu vrednost impulsa u osnovnom stanju koristeći $\psi_1(x)$ i $\tilde{\psi}_1(p)$.

3.29 Dokazati Baker-Campbell-Hausdorff-ovu formulu (3.106):

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots + \frac{1}{n!} \underbrace{[A, [A, \dots [A, B] \dots]]}_{n \times} + \dots$$

3.30 Ako su A i B takvi operatori da komutiraju sa njihovim komutatorom $[A, B]$ (što će reći da je $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$) pokazati da važi Zassenhaus-ova formula

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]}.$$

3.31 Pokazati da 'clock' i 'shift' matrice definisane u (3.112) zadovoljavaju

- a) $[\hat{u}, \hat{v}] = (q-1)\hat{v}\hat{u}$
 b) $\hat{u}^\dagger = \hat{u}^{-1}, \quad \hat{v}^\dagger = \hat{v}^{-1}$
 c) $\hat{u}^n = \hat{v}^n = 1$

3.32* Ako su $f(x, p)$ i $g(x, p)$ funkcije u faznom prostoru, kao pravilo množenja možemo da uvedemo Moyal-ov ili \star -proizvod

$$f(x, p) \star g(x, p) = f(x, p) \exp\left(\frac{i\hbar}{2} (\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x)\right) g(x, p).$$

Koristeći Moyal-ov proizvod možemo definisati \star -komutator

$$[f, g]_\star = f \star g - g \star f.$$

Pokazati

- a) $[x, p]_{\star} = i\hbar$,
- b) $[f, g]_{\star} = i\hbar\{f, g\}_{\text{PZ}} + O(\hbar^2)$.
- c) Moyal-ov proizvod može se ekvivalentno definisati preko Fourier-ove transformacije sledećom formulom (ovde je $\hbar = 1$)

$$\widetilde{f \star g}(y, q) = \frac{1}{2\pi} \int dx dp e^{\frac{i}{2}(xq - yp)} \tilde{f}\left(\frac{y}{2} + x, \frac{q}{2} + p\right) \tilde{g}\left(\frac{y}{2} - x, \frac{q}{2} - p\right).$$

3.33* Neka je $U_1(x)$ potencijal koji ima vezana stanja i neka je $\psi_0(x)$ osnovno stanje sa energijom $E_0 = 0$.

- a) Pokazati da se hamiltonijan jednodimenzione čestice koja se nalazi u ovom potencijalu može faktorisati kao

$$H_1 = A^\dagger A,$$

gde su

$$A = W(x) + \frac{i}{\sqrt{2m}} p = W(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx}, \quad A^\dagger = W(x) - \frac{i}{\sqrt{2m}} p = W(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx}.$$

Ovde smo uveli novu veličinu $W(x)$ koja se zove superpotencijal. On zavisi od potencijalne energije $U_1(x)$. Naći vezu između potencijalne energije $U_1(x)$ i superpotencijala $W(x)$.

- b) Pokazati da je superpotencijal povezan sa talasnom funkcijom osnovnog stanja ψ_0 na sledeći način:

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'}{\psi_0}.$$

Neka je

$$H_2 = AA^\dagger,$$

supersimetrični partner hamiltonijana H_1 . Uvedimo supersimetrični hamiltonijan

$$H = \begin{pmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{pmatrix}.$$

i "fermionske" operatore

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

- d) Pokazati da se uvedene veličine zatvaraju u supersimetričnu algebru

$$[H, Q] = 0, \quad [H, Q^\dagger] = 0, \quad \{Q, Q\} = 0, \quad \{Q^\dagger, Q^\dagger\} = 0, \quad \{Q, Q^\dagger\} = H.$$

- e) Diskutovati spektar energije i svojstvena stanja hamiltonijana supersimetričnog partnera H_2 i naći vezu sa spektrom i svojstvenim stanjima polaznog hamiltonijana H_1 .
- f) Odrediti supersimetrične partnere za česticu mase m koja se nalazi u potencijalu harmonijskog oscilatora sopstvene frekvencije ω kao i u beskonačno dubokoj potencijalnoj jami širine a .

3.34 Pokazati da je evolucioni operator hamiltonijana $H(p, x, t)$ koji eksplicitno zavisi od vremena jednak

$$U(t_0, t) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_2) \\ + \frac{1}{(i\hbar)^3} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_2) \int_{t_0}^{t_2} dt_3 H(t_3) + \dots$$

Uputstvo: naći diferencijalnu jednačinu i početni uslov koju zadovoljava $U(t_0, t)$, a potom pokazati da data funkcija ispunjava oba uslova.

3.35 Ako su a^\dagger kreacioni, a anihilacioni i $N = a^\dagger a$ operator broja čestica harmonijskog oscilatora, odrediti:

- a) $[a^n, a^\dagger]$,
- b) $[a, (a^\dagger)^n]$,
- c) $[a^n, N]$.

3.36 Koristeći operatore kreacije i anihilacije, odrediti $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ i $\Delta x \Delta p$ u n -tom svojstvenom stanju harmonijskog oscilatora $|n\rangle$.

3.37 Naći rešenje diferencijalne jednačine (3.163) za osnovno stanje harmonijskog oscilatora, a potom, koristeći se izrazom za a^\dagger u koordinatnoj reprezentaciji napisati kako izgledaju talasne funkcije pobuđenih stanja.

3.38* Diskretna aproksimacija operatora koordinate može se dobiti tako što se u operatoru x u reprezentaciji energije ostave prvih n vrsta i n kolona, pri čemu x postane $n \times n$ matrica x_n .

- a) Odrediti operatore koordinate i impulsa u bazu svojstvenih stanja energije.
- b) Napisati u *Mathematica*TM matricu x_n a onda naći numeričke vrednosti za svojstvene vrednosti te matrice (u jedinicama $\sqrt{\hbar/(2m\omega)}$). Šta se dešava sa svojstvenim vrednostima kako n raste?

3.39 Napisati relacije (3.156) i (3.157) u koordinatnoj reprezentaciji i pokazati da one daju rekurentne veze između Hermité-ovih polinoma.

3.40 Odrediti operatore kreacije $\hat{a}^\dagger(t)$ i anihilacije $\hat{a}(t)$ u Heisenberg-ovoj slici, a potom i $\hat{x}(t)$, $\hat{p}(t)$. Odrediti komutatore

$$[\hat{x}(t_1), \hat{x}(t_2)], \quad [\hat{x}(t_1), \hat{p}(t_2)]$$

u različitim trenucima vremena.

3.41 Koristeći komutacionu relaciju (3.149) pokazati da je

$$e^{-\alpha a^\dagger} a e^{\alpha a^\dagger} = a + \alpha,$$

gde je α kompleksan broj. Pomoću dobijenog rezultata, pokazati da je $|\alpha\rangle = e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle$ koherentno stanje, odnosno da je $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$.

3.42* Za koherentno stanje $|z\rangle$:

a) pokazati da je

$$|z\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle;$$

b) odrediti skalarni proizvod $\langle z_1 | z_2 \rangle$;

c) pokazati da za očekivane vrednosti važi

$$\langle z | \hat{x} | z \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(z), \quad \langle z | \hat{p} | z \rangle = \sqrt{2\hbar m\omega} \operatorname{Im}(z);$$

d) proizvod disperzije koordinate i impulsa $\Delta x \Delta p$ je minimalan.

3.43 Naći evoluciju sistema koji je u početnom trenutku $t = 0$ u koherentnom stanju $|\alpha\rangle$. Odrediti očekivanu vrednost koordinate i impulsa u proizvoljnom trenutku t .

TRODIMENZIONNI SISTEMI

U ovoj kratkoj glavi uvešćemo još jednu važnu fizičku opservablu, moment impulsa, i odrediti osobine kretanja elektrona u Coulomb-ovom potencijalu i u homogenom magnetnom polju.

4.1 Orbitni ugaoni moment

Već smo u uvodu videli da je, za razliku od koordinate i impulsa, moment impulsa fizička veličina koja ima diskretni spektar. Moment impulsa definiše se kao i u klasičnoj mehanici izrazom $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, odnosno

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x. \quad (4.1)$$

Prvo možemo da primetimo da su komponente operatora momenta impulsa dobro tj. jednoznačno definisane gornjim izrazima jer raznoimene koordinate i impulsi komutiraju,

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad (4.2)$$

pa problem operatorskog uređenja ne postoji. Koristeći tenzor Levi-Civita ϵ_{ijk} koji je antisimetričan pri izmeni svaka dva indeksa (uz $\epsilon_{123} = 1$), vektorski proizvod može da se izrazi kao

$$L_i = \epsilon_{ijk}x_jp_k. \quad (4.3)$$

Ovde se, kao i ranije, koristi sumaciona konvencija: po svakom ponovljenom indeksu se podrazumeva sumiranje po svim njegovim vrednostima tj. od 1 do 3.

Komponente momenta impulsa međusobno ne komutiraju: lako se može proveriti da je

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad (4.4)$$

i opštije,

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k. \quad (4.5)$$

Pošto je \vec{L} proizvod koordinate i impulsa, on ima dimenzije dejstva odnosno Planck-ove konstante \hbar . Sve komponente momenta impulsa komutiraju sa \vec{L}^2 ,

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = L_i L_i. \quad (4.6)$$

Ove komutacione relacije znače da moment impulsa kao vektor ne može tačno da se izmeri, odnosno da sve njegove komponente ne mogu istovremeno da imaju precizno određene vrednosti ni u jednom fizičkom stanju (osim ako su sve 0). Stanja koja daju maksimalnu¹ informaciju o momentu impulsa su zajednička svojstvena stanja kvadrata L^2 i jedne od projekcija, na primer L_z . Definišimo operatore podizanja i spuštanja

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y, \quad L_- = (L_+)^{\dagger}. \quad (4.7)$$

Za njih važi

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}, \quad [L_+, L_-] = 2\hbar L_z. \quad (4.8)$$

Izražen preko L_{\pm} i L_z , kvadrat momenta impulsa je

$$\vec{L}^2 = L_-L_+ + L_z^2 + \hbar L_z = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z. \quad (4.9)$$

Zajednička svojstvena jednačina za L^2 i L_z može da se reši u koordinatnoj reprezentaciji. Pošto moment impulsa, videćemo a i znamo iz klasične mehanike, generiše rotacije, najjednostavnije je da ga reprezentujemo u sfernim koordinatama. Veza između Descartes-ovih koordinata (x, y, z) i sfernih koordinata (r, θ, φ) je

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta, \quad (4.10)$$

odnosno

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \theta = \arctan \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}, \quad \varphi = \arctan \frac{y}{x}, \quad (4.11)$$

pri čemu su njihove vrednosti iz intervala $x, y, z \in (-\infty, +\infty)$, tj. $r \in [0, \infty)$, $\theta \in [0, \pi)$, $\varphi \in [0, 2\pi)$. Da bi se odredile komponente

$$L_i = -i\hbar \epsilon_{ijk} x_j \partial_k \quad (4.12)$$

treba izvršiti smenu promenljivih. Iz

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

i izraza (4.10) za koordinate dobijamo

$$\begin{aligned} L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ L_x &= i\hbar \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i\hbar \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ L_y &= -i\hbar \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i\hbar \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ L_{\pm} &= \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \end{aligned} \quad (4.14)$$

¹Ovo nisu stanja koja minimizuju neodređenost merenja \vec{L} , odnosno $\Delta L_x + \Delta L_y + \Delta L_z$: za moment impulsa se takođe uvode koherentna stanja, i mi ćemo ih definisati kasnije, kroz zadatke.

kao i

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right). \quad (4.15)$$

Vidimo da komponente momenta impulsa ne zavise od radijalne koordinate r . Prema tome, pri rešavanju zajedničkog svojstvenog problema

$$\begin{aligned} L^2\psi(r, \theta, \varphi) &= a\hbar^2\psi(r, \theta, \varphi) \\ L_z\psi(r, \theta, \varphi) &= b\hbar\psi(r, \theta, \varphi), \end{aligned} \quad (4.16)$$

možemo razdvojiti promenljive,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)f(\theta, \varphi). \quad (4.17)$$

Pri tome gornje jednačine postaju

$$\hbar^2 R \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (\sin\theta \frac{\partial f}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2} \right) = a\hbar^2 R f \quad (4.18)$$

$$-i\hbar R \frac{\partial f}{\partial\varphi} = b\hbar R f, \quad (4.19)$$

pa se odmah vidi da funkciju $R(r)$ možemo da škratimo", odnosno da ona nije određena iz sistema jednačina (4.18-4.19). I promenljive θ i φ mogu da se razdvoje. Pretpostavljajući da je

$$f(\theta, \varphi) = T(\theta)F(\varphi), \quad (4.20)$$

jednačina (4.19) se svodi na

$$-i\hbar \frac{dF}{d\varphi} = b\hbar F, \quad (4.21)$$

i ima rešenje

$$F(\varphi) = e^{ib\varphi}. \quad (4.22)$$

Iz zahteva da je vrednost funkcije $F(\varphi)$ odnosno ukupne talasne funkcije $\psi(r, \theta, \varphi)$ ista za $\varphi = 0$ i $\varphi = 2\pi$ (odnosno da je talasna funkcija jednoznačno definisana u xz -ravni) dobijamo da b mora biti ceo broj, $b = m$. Znači, vrednosti L_z , pa samim tim i svake projekcije momenta impulsa (jer izbor z -ose je samo izbor koordinatnog sistema) su kvantovane.

Pošto su sve promenljive u talasnoj funkciji razdvojene,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)T(\theta)F(\varphi), \quad (4.23)$$

normiranje može da se vrši po svakoj koordinati zasebno. Uslov

$$\int \psi^* \psi dV = 1 \quad (4.24)$$

se onda svodi na

$$\int_0^\infty R^* R r^2 dr = 1, \quad \int_0^\pi T^* T \sin\theta d\theta = 1, \quad \int_0^{2\pi} F^* F d\varphi = 1. \quad (4.25)$$

Prema tome, normirane svojstvene funkcije operatora L_z su

$$F_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \quad (4.26)$$

Zamenjujući $F_m(\varphi)$ u jednačinu (4.18) dobijamo diferencijalnu jednačinu za $T(\theta)$:

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\frac{dT}{d\theta} \right) + \left(a - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right) T = 0. \quad (4.27)$$

Ova jednačina zavisi od obe svojstvene vrednosti, a i $b = m$, i može se prevesti u polinomijalni oblik uvođenjem smene

$$\xi = \cos\theta, \quad \frac{d}{d\xi} = -\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta}. \quad (4.28)$$

Dobija se

$$\frac{d}{d\xi} \left((1 - \xi^2) \frac{dT}{d\xi} \right) + \left(a - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right) T = 0. \quad (4.29)$$

Za $m = 0$, (4.29) je Legendre-ova jednačina

$$(\xi^2 - 1) T'' + 2\xi T' - aT = 0, \quad (4.30)$$

koja se može rešiti razvojem rešenja u red i analizom graničnih uslova. Za $a = l(l+1)$ i celobrojno l ona ima integrabilna, fizička rešenja – Legendre-ove polinome $P_l(\xi)$,

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} \left((\xi^2 - 1)^l \right). \quad (4.31)$$

Broj l je pozitivan broj ili nula, a $P_l(\xi)$ je, očigledno, parni ili neparni polinom stepena l ,

$$P_l(-\xi) = (-1)^l P_l(\xi). \quad (4.32)$$

Legendre-ovi polinomi su ortonormirani

$$\int_{-1}^1 P_l(\xi) P_k(\xi) d\xi = \frac{2}{2l+1} \delta_{lk}. \quad (4.33)$$

Za $m \neq 0$ fizička rešenja jednačine (4.29) su pridružene Legendre-ove funkcije:

$$P_l^m(\xi) = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} P_l(\xi), \quad (4.34)$$

odnosno

$$P_l^m(\cos\theta) = (\sin\theta)^{|m|} \frac{d^{|m|}}{d(\cos\theta)^{|m|}} P_l(\cos\theta). \quad (4.35)$$

Iz prethodne jednačine vidimo da je $m \leq l$; P_l^m naravno nisu polinomi. Relacije ortonormiranosti za pridružene Legendre-ove funkcije glase

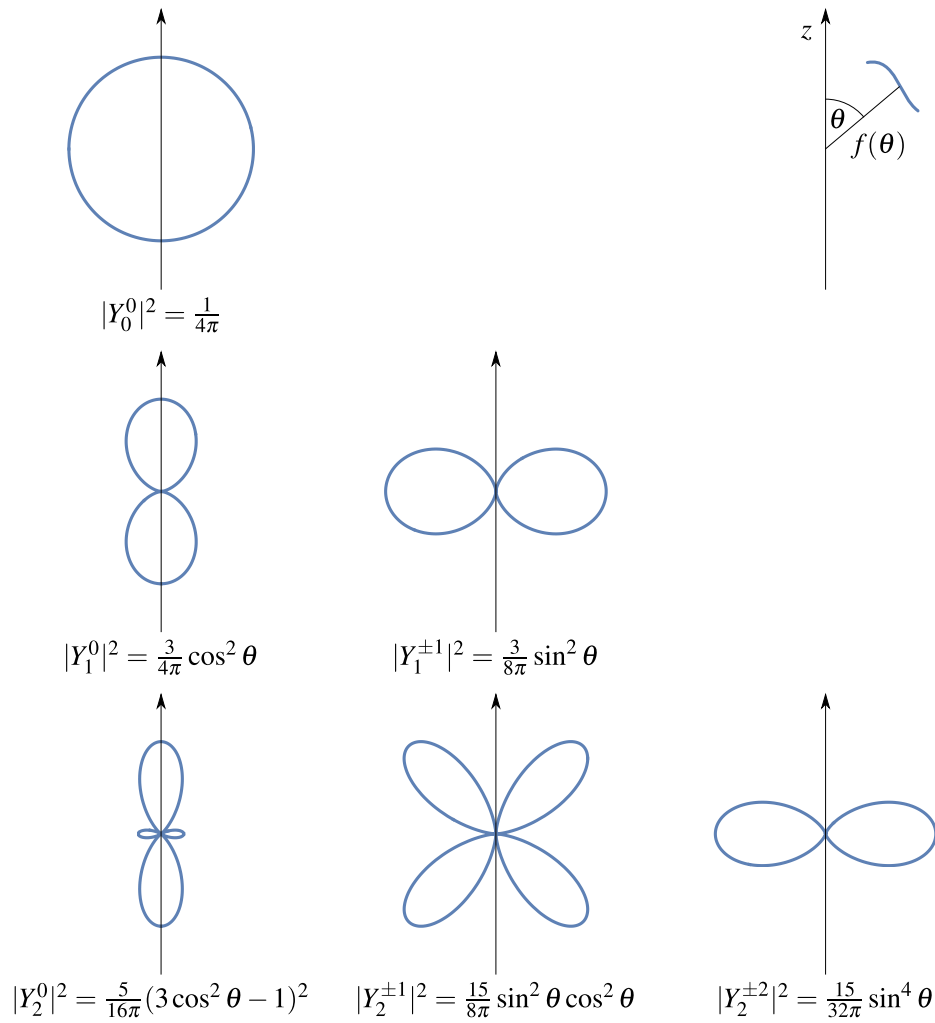
$$\int_0^\pi P_k^m(\cos\theta) P_l^m(\cos\theta) \sin\theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} \delta_{kl}. \quad (4.36)$$

Ukupno, rešenja jednačina (4.18-4.19) su

$$f_{ml}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle = T_{ml}(\theta) F_m(\varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (4.37)$$

i zovu se *sferni harmonici*. Ona predstavljaju koordinatnu reprezentaciju svojstvenih vektora $|l, m\rangle$ ugaonog momenta za celobrojne vrednosti l i m :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad m = -l, -l+1, \dots, l. \quad (4.38)$$



Slika 4.1: Polarni dijagrami: vrednosti $|Y_l^m|^2$ zavise samo od ugla θ . Na crtežima, rastojanje od koordinatnog početka jednako je $|Y_l^m|^2$, tako da polarni dijagram daje oblik prostorne raspodele verovatnoće zadate sfernim harmonikom Y_l^m .

Sferni harmonici su ortonormirani

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) \sin \theta \, d\theta \, d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (4.39)$$

a nekoliko funkcija sa najnižim vrednostima l i m su

$$l = 0: \quad Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$l = 1: \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^{\pm 1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi},$$

$$l = 2: \quad Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_2^{\pm 1} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}, \quad Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}.$$

4.2 Čestica u sferno simetričnom potencijalu

Sada ćemo preći na rešavanje stacionarne Schrödinger-ove jednačine za česticu u sferno-simetričnom potencijalu. Njen hamiltonijan je

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(r), \quad (4.40)$$

a potencijalna energija zavisi samo od radijalnog rastojanja, $r = |\vec{r}|$. Pri kretanju u polju centralne sile moment impulsa čestice, kao i u klasičnoj mehanici, se održava. U kvantnoj mehanici, videćemo u sledećoj glavi, to znači da je $[H, L_i] = 0$, iz čega sledi da se H može dijagonalizovati istovremeno sa L^2 i L_z . Takođe, iz oblika laplasijana u sfernim koordinatama

$$\Delta\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\psi) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}, \quad (4.41)$$

se vidi da je operator kinetičke energije

$$\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right). \quad (4.42)$$

Schrödinger-ova jednačina za kretanje čestice u sferno-simetričnom potencijalu glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{L^2}{2mr^2} \psi + U\psi = E\psi. \quad (4.43)$$

Očigledno je da se u ovoj jednačini promenljive mogu razdvojiti, pri čemu se za ugaoni deo rešenja mogu uzeti sferni harmonici jer je kompletna zavisnost od uglova u jednačini data preko L^2 ,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (4.44)$$

Smenom u (4.43) dobija se *radijalna jednačina*, odnosno jednačina za radijalni deo talasne funkcije $R(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{d^2}{dr^2}(rR) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U \right) R = ER \quad (4.45)$$

ili, ako uvedemo funkciju $u(r) = rR(r)$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u'' + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U \right) u = Eu. \quad (4.46)$$

Rešavanje jednačine za kretanje čestice u centralno-simetričnom potencijalu, kao i u klasičnoj mehanici, svodi se na jednodimenzioni problem: jednačina (4.46) ima oblik Schrödinger-ove jednačine za česticu u efektivnom potencijalu

$$U_{\text{eff}} = U + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}. \quad (4.47)$$

Drugi član u (4.47), *centrifugalna barijera*, potiče od momenta impulsa. Normalizacija radijalne funkcije u ovom slučaju glasi

$$\int_0^\infty R^* R r^2 dr = \int_0^\infty u^* u dr = 1. \quad (4.48)$$

4.3 Atom vodonika

Atom vodonika sastoji se od elektrona i protona, a njihova interakcija je opisana elektrostatičkim Coulomb-ovim potencijalom. Hamiltonijan sistema je

$$H = \frac{\vec{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\vec{p}_p^2}{2m_p} + \frac{q_e q_p}{|\vec{r}_e - \vec{r}_p|}, \quad (4.49)$$

gde je naelektrisanje protona $q_p = -q_e = -e$, a elektrostatički potencijal napisan je u CGS-sistemu jedinica. Masa protona m_p mnogo je veća od mase elektrona, $m_e = m$, $m_p \sim 2000m$, pa je njegova kinetička energija mnogo manja. Zato je fizički opravdano pretpostaviti da proton miruje, odnosno

$$\vec{r}_p = 0, \quad \vec{r}_e - \vec{r}_p = \vec{r}, \quad T_p = 0. \quad (4.50)$$

Razume se, ove jednačine u kvantnoj mehanici nemaju smisla zbog relacija neodređenosti, i treba da se nađe neki drugi, operatorski način da se ovakva aproksimacija uvede. U ovom konkretnom slučaju to je dosta jednostavno jer se problem dva tela i u kvantnoj (kao i u klasičnoj) mehanici može svesti na problem jedne čestice, ako se posmatra u sistemu centra mase.

Uvedimo naime vektore položaja *centra mase* sistema i *relativne čestice*, \vec{R} i \vec{r} , i njihove mase M i m ,

$$\begin{aligned} \vec{r}_{CM} = \vec{R} &= \frac{m_e \vec{r}_e + m_p \vec{r}_p}{m_e + m_p}, & m_{CM} = M &= m_e + m_p, \\ \vec{r}_{rel} = \vec{r} &= \vec{r}_e - \vec{r}_p, & m_{rel} = m &= \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}. \end{aligned} \quad (4.51)$$

U lagranžijanu

$$L = \frac{1}{2} m_e \dot{\vec{r}}_e^2 + \frac{1}{2} m_p \dot{\vec{r}}_p^2 - U(\vec{r}_e - \vec{r}_p) \quad (4.52)$$

lako možemo da pređemo na promenljive \vec{r} i \vec{R} a zatim da nađemo odgovarajuće generalisane impulse \vec{p} i \vec{P} . Dobija se da je

$$\vec{P} = M\dot{\vec{R}}, \quad \vec{p} = m\dot{\vec{r}}. \quad (4.53)$$

Položaj i impuls centra mase i relativne čestice su nezavisne kanonske varijable pa su njihove Poisson-ove zagrade, odnosno u kvantnoj mehanici komutatori, dati sa

$$\begin{aligned} [x_i, p_j] &= i\hbar\delta_{ij}, & [x_i, x_j] &= 0, & [p_i, p_j] &= 0, \\ [X_i, P_j] &= i\hbar\delta_{ij}, & [X_i, X_j] &= 0, & [P_i, P_j] &= 0, \\ [x_i, P_j] &= 0, & [X_i, p_j] &= 0, & [x_i, X_j] &= 0, & [p_i, P_j] &= 0. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Hamiltonijan ukupnog sistema je zbir hamiltonijana podsystema koji ne interaguju,

$$H = H_{CM} + H_{rel} = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) \quad (4.55)$$

i zato se njihova kretanja mogu posmatrati i rešavati nezavisno, kao i u klasičnoj mehanici. Za sistem elektron-proton imamo

$$\begin{aligned} m_{CM} = M &\approx m_p, & m_{rel} = m &\approx m_e, \\ \vec{r}_{CM} = \vec{R} &\approx \vec{r}_p, & \vec{r}_{rel} = \vec{r} &\approx \vec{r}_e, \end{aligned} \quad (4.56)$$

pa se elektron može identifikovati sa relativnom česticom čije kretanje se rešava egzaktno. U tom smislu, naš zadatak određivanja vezanih stanja protona i elektrona i njihovih energija svodi

se na rešavanje Schrödinger-ove jednačine i određivanje vezanih stanja elektrona u statičkom Coulomb-ovom potencijalu

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}. \quad (4.57)$$

U poslednjoj jednačini smo, kao što je dosta uobičajeno, napisali potencijal elektrona u elektrostatičkom polju jezgra naelektrisanja $-Ze$, tj. u "vodoniku sličnom atomu" atomskog broja Z .

Radijalna jednačina (4.46) sada glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u'' + \left(-\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) u = Eu. \quad (4.58)$$

Prvo ćemo ispitati asimptotski oblik funkcije $u(r)$ tj. njeno ponašanje u dve granične tačke, $r = \infty$ i $r = 0$. U beskonačnosti efektivni potencijal teži nuli pa jednačina postaje

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u'' = Eu. \quad (4.59)$$

Za $E > 0$ asimptotska rešenja ove jednačine su ravni talasi, tj. radijalni deo talasne funkcije $R(r) = u(r)/r$ je sferni talas: elektron je slobodan. Ta rešenja opisuju rasejanje elektrona a ne vezana stanja elektrona i protona, i na njih ćemo se vratiti u poslednjoj glavi. Nas interesuje slučaj $E < 0$ i rešenje koje u beskonačnosti eksponencijalno opada,

$$u(r) \sim e^{-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} r}, \quad r \rightarrow \infty. \quad (4.60)$$

U drugoj graničnoj tački, $r = 0$, najveći član uz u u jednačini (4.58) je centrifugalni, pa rešenja zadovoljavaju

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u'' + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} u = 0, \quad (4.61)$$

odnosno

$$r^2 u'' = l(l+1)u. \quad (4.62)$$

Znači, u koordinatnom početku talasna funkcija se ponaša kao

$$u(r) \sim r^{l+1}, \quad r \rightarrow 0, \quad (4.63)$$

jer drugo rešenje, $u(r) \sim r^{-l}$, divergira u $r = 0$. Oblik (4.63) obezbeđuje da je gustina verovatnoće

$$|\psi|^2 = \frac{|u|^2 |Y_l^m|^2}{r^2} \quad (4.64)$$

regularna u koordinatnom početku za sve vrednosti l . Dakle, pretpostavićemo rešenje oblika

$$u(r) = e^{-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} r} v(r) = e^{-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} r} \sum_{n=l+1}^{\infty} a_n r^n. \quad (4.65)$$

Uvodeći ovu smenu, iz (4.65) i (4.58) dobijamo jednačinu za $v(r)$,

$$v'' - 2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} v' - \frac{l(l+1)}{r^2} v + \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \frac{v}{r} = 0, \quad (4.66)$$

iz koje sledi rekurentna relacija za koeficijente u razvoju

$$(n(n+1) - l(l+1))a_{n+1} = \left(2n\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} - \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \right) a_n. \quad (4.67)$$

Za $n \rightarrow \infty$ odnosno za veliko r , poslednja relacija se približno svodi na

$$a_{n+1} = \frac{2}{n+1} \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} a_n, \quad (4.68)$$

odnosno

$$a_{n+1} = \frac{1}{(n+1)!} \left(2 \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \right)^n a_0. \quad (4.69)$$

Ovakav razvoj u red ima funkcija

$$v(r) \sim e^{2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} r} \quad (4.70)$$

pa odgovarajuće $u(r)$ u asimptotskoj oblasti eksponencijalno raste,

$$u(r) \sim e^{\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} r} \quad (4.71)$$

i nije fizičko. Rešenje (4.65) je fizičko odnosno normalizabilno samo kada se red $\sum a_k r^k$ prekida i svodi na polinom, tj. kada se svi koeficijenti u razvoju počevši od određene vrednosti, $k = n+1$, anuliraju:

$$a_{n+1} = 0, \quad n \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{mZe^2}{\hbar^2}. \quad (4.72)$$

Ovaj uslov fiksira dozvoljene vrednosti energije,

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (4.73)$$

Za svako $n > l \geq 0$ imamo po jedno ovakvo rešenje, odnosno jednu funkciju $v_{nl}(r)$. Energija odgovarajućeg stanja je diskretna, kvantovana brojem n . Iako u jednačini (4.66) kvantni broj momenta impulsa l figuriše eksplicitno, svojstvene energije od njega ne zavise. Ova degeneracija energije naziva se *slučajna degeneracija* i postoji samo kod potencijala oblika r^{-1} (i r^2): videćemo kasnije da je ona posledica dodatne simetrije koju ima Coulomb-ov potencijal. Svojstvene funkcije v_{nl} naravno zavise i od n i od l . One se mogu izraziti preko Laguerre-ovih i pridruženih Laguerre-ovih polinoma koji se definišu kao

$$L_n(\xi) = e^\xi \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi} \xi^n), \quad L_n^k(\xi) = (-1)^k \frac{d^k}{d\xi^k} L_{n+k}(\xi). \quad (4.74)$$

Ukupno, vezanja stanja elektrona u atomu vodonika opisana su talasnim funkcijama

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (4.75)$$

gde je radijalni deo

$$R_{nl}(r) = e^{-\frac{Zr}{na_0}} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right). \quad (4.76)$$

Konstanta a_0 naziva se Bohr-ov radijus i daje red veličine atoma

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}, \quad (4.77)$$

a energija osnovnog stanja elektrona u atomu vodonika je

$$E_0 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -\frac{e^2}{2a_0} = -13.6 \text{ eV}. \quad (4.78)$$

Vrednosti ove dve konstante određuju karakteristične skale dužine i energije u atomskoj fizici. Svojsvene funkcije elektrona u vodonikovom atomu imaju tri kvantna broja: kvantni broj energije $n = 1, 2, 3, \dots$, kvantni broj kvadrata momenta impulsa $l = 0, 1, \dots, n - 1$ i kvantni broj z -projekcije momenta impulsa (magnetni kvantni broj) $m = -l, \dots, l$. Degeneracija n -tog energetskog nivoa je n^2 , jer

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l 1 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n(n-1) + n = n^2. \quad (4.79)$$

Napisaćemo talasne funkcije osnovnog i prvog pobuđenog stanja elektrona:

$$\begin{aligned} 1s \quad \psi_{100} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \\ 2s \quad \psi_{200} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \\ 2p \quad \psi_{210} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \cos\theta \\ 2p \quad \psi_{21\pm 1} &= \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \sin\theta e^{\pm i\varphi}. \end{aligned} \quad (4.80)$$

U spektroskopskim oznakama koje su napisane levo, s -stanja označavaju vrednosti $l = 0$ kvantnog broja ugaonog momenta, p -stanja imaju $l = 1$, d -stanja $l = 2$, f -stanja $l = 3$ i tako dalje.

4.4 Čestica u elektromagnetnom polju

U prethodnom poglavlju videli smo kako se rešava Schrödinger-ova jednačina u slučaju kretanja elektrona u elektrostatičkom potencijalu tačkastog naelektrisanja jezgra. Hamiltonijan čestice koja se kreće u statičkom električnom polju $\vec{E} = -\text{grad}\Phi$, dat je preko elektrostatičkog potencijala $\Phi(\vec{r})$,

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + e\Phi(\vec{r}) + U(\vec{r}), \quad (4.81)$$

gde je $U(\vec{r})$ potencijalna energija ostalih polja koja deluju na česticu. U opštem slučaju, hamiltonijan čestice u spoljašnjem elektromagnetnom polju dobija se iz hamiltonijana

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) \quad (4.82)$$

metodom *minimalne zamene*:

$$H \rightarrow H - e\Phi, \quad \vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}, \quad (4.83)$$

gde su $\Phi(\vec{r}, t)$ i $\vec{A}(\vec{r}, t)$ skalarni i vektorski potencijal elektromagnetnog polja. Jačine električnog i magnetnog polja date su sa

$$\vec{E} = -\text{grad}\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \text{rot}\vec{A}. \quad (4.84)$$

Prema tome, hamiltonijan čestice u spoljašnjem elektromagnetnom polju je

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 + e\Phi + U. \quad (4.85)$$

U kinetičkom članu uređenje impulsa \vec{p} i koordinata koje figurišu u vektorskom potencijalu $\vec{A}(\vec{r})$ je simetrično,

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 = \vec{p}^2 - \frac{e}{c}(\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{e^2}{c^2}\vec{A}^2. \quad (4.86)$$

Schrödinger-ova jednačina za naelektrisanu česticu u elektromagnetnom polju glasi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \Psi + e\Phi \Psi + U\Psi. \quad (4.87)$$

Izvedimo gustinu i fluks verovatnoće u ovom slučaju. Kompleksnom konjugacijom iz (4.87) dobijamo

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(i\hbar \nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \Psi^* + e\Phi \Psi^* + U\Psi^*, \quad (4.88)$$

pa se ponavljanjem postupka koji smo izveli ranije dobija jednačina kontinuiteta

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0, \quad (4.89)$$

gde je

$$\rho = \Psi^* \Psi, \quad \vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{e}{mc} \vec{A} \Psi^* \Psi. \quad (4.90)$$

Izraz za fluks verovatnoće za česticu u spoljašnjem elektromagnetnom polju se menja.

Izvešćemo hamiltonijane za naelektrisanu česticu u slučajevima najjednostavnijih konfiguracija elektromagnetnog polja. *Statičko, homogeno električno polje*, $\vec{E} = \text{const}$, može se opisati potencijalom

$$\Phi = -\vec{E} \cdot \vec{r}, \quad \vec{A} = 0. \quad (4.91)$$

pa je odgovarajući hamiltonijan

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - e\vec{E} \cdot \vec{r} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \vec{d} \cdot \vec{E}. \quad (4.92)$$

U drugom članu prepoznamo potencijalnu energiju električnog dipola dipolnog momenta $\vec{d} = e\vec{r}$. Ovaj izraz za potencijalnu energiju često se primenjuje i kada je električno polje slabo nehomogeno i ta aproksimacija se zove *dipolna aproksimacija*.

Naći ćemo analogan približan izraz za hamiltonijan naelektrisane čestice u *statičkom homogenom magnetnom polju*, $\vec{B} = \text{const}$. Lako se vidi da je jedan od mogućih izbora za elektromagnetni potencijal

$$\Phi = 0, \quad \vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B}. \quad (4.93)$$

Energija interakcije sa magnetnim poljem je obično mala: zato ćemo u gornjem izrazu zadržati samo linearni član. Dobijamo

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_i + \frac{e}{2c} \epsilon_{ijk} r_j B_k\right)^2 \approx \frac{p_i p_i}{2m} + \frac{e}{2mc} \epsilon_{ijk} p_i x_j B_k, \quad (4.94)$$

odnosno

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc} \vec{L} \cdot \vec{B} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \vec{\mu} \cdot \vec{B}, \quad (4.95)$$

gde je sa $\vec{\mu}$ označen magnetni dipolni moment elektrona koji potiče od njegovog momenta impulsa,

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} \vec{L} = -\mu_B \vec{L}. \quad (4.96)$$

Konstanta μ_B naziva se *Bohr-ov magneton*,

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc}. \quad (4.97)$$

Analogan sa (4.96) je klasični izraz za magnetni dipolni moment tankog kružnog prstena poluprečnika R kroz koji protiče električna struja jačine $I = -e/T = -ev/2\pi R$ (T je period kružnog kretanja elektrona kroz prsten),

$$\mu = I\pi R^2 = -\frac{e}{2m} L. \quad (4.98)$$

4.5 Landau-ov problem

Kretanje elektrona u konstantnom magnetnom polju jedan je od problema koji se mogu rešiti egzaktno i u klasičnoj i u kvantnoj mehanici. Ako z -osu usmerimo duž magnetnog polja, $\vec{B} = B\vec{e}_z$, a za vektorski potencijal izaberemo $\vec{A} = xB\vec{e}_y$, hamiltonijan je

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2m} \left(p_y - \frac{eB}{c} x \right)^2 + \frac{p_z^2}{2m}. \quad (4.99)$$

U sledećoj glavi ćemo pokazati da je gradijentna simetrija elektromagnetizma, simetrija i Schrödinger-ove jednačine, pa vektorski potencijal tj. gradijentni uslov možemo da izaberemo tako da se jednačina maksimalno pojednostavi. Stacionarna Schrödinger-ova jednačina glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + i \frac{\hbar e B}{mc} x \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{e^2 B^2}{2mc^2} x^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = E\psi. \quad (4.100)$$

Ova jednačina se može rešiti razdvajanjem promenljivih. Ako pretpostavimo da je

$$\psi(x, y, z) = F(x, y)Z(z), \quad (4.101)$$

razdvajanjem promenljivih x, y i z dobijamo

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Z}{dz^2} &= E_z Z, \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + i \frac{\hbar e B}{mc} x \frac{\partial F}{\partial y} + \frac{e^2 B^2}{2mc^2} x^2 F &= (E - E_z) F. \end{aligned} \quad (4.102)$$

Rešenje za $Z(z)$ je ravan talas,

$$Z(z) = e^{ik_z z}, \quad k_z^2 = \frac{2mE_z}{\hbar^2}. \quad (4.103)$$

Analizirajući drugu jednačinu vidimo da ona ima partikularna rešenja oblika

$$F(x, y) = e^{ik_y y} X(x). \quad (4.104)$$

Uvođenjem ove smene dobijamo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{1}{2m} \left(\hbar k_y - \frac{eB}{c} x \right)^2 X = (E - E_z) X. \quad (4.105)$$

Ova jednačina se smenom promenljive

$$\tilde{x} = x - \frac{c\hbar}{eB} k_y \quad (4.106)$$

svodi na jednačinu za harmonijski oscilator,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{d\tilde{x}^2} + \frac{1}{2} m\omega_L^2 \tilde{x}^2 X = (E - E_z) X. \quad (4.107)$$

Konstanta $\omega_L = eB/(mc)$ naziva se *Larmor-ova frekvencija*. Rešenja poslednje jednačine su svojstvene funkcije harmonijskog oscilatora mase m i frekvence ω_L , a ukupna energija elektrona $E_{k_z n}$ je zbir energije ravnog talasa duž z -ose i energije harmonijskog oscilatora,

$$E_{k_z n} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_L. \quad (4.108)$$

Energija kretanja u ravni normalnoj na magnetno polje je kvantovana. Svojstvene funkcije su

$$\psi_{k_z n}(x, y, z) = \frac{A_n}{2\pi} e^{ik_z z + ik_y y} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \quad (4.109)$$

gde je $\xi = \sqrt{\frac{m\omega_L}{\hbar}} \tilde{x}$ a konstante A_n date su u (2.235).

4.6 Dodatak

Nabla u sfernim i cilindričnim koordinatama

Neka je $f(\vec{r})$ skalarna funkcija a $\vec{F}(\vec{r})$ vektorska funkcija. Veze između Descartes-ovih koordinata (x, y, z) , sfernih koordinata (r, θ, φ) i cilindričnih koordinata (ρ, z, φ) su

$$x = r \sin \theta \cos \varphi = \rho \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi = \rho \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta.$$

Diferencijalni operatori nabla ∇ i laplasijan $\Delta = \nabla \cdot \nabla$ deluju na skalarne i vektorske funkcije na sledeći način:

$$\begin{aligned} \nabla f &= \frac{\partial f}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial f}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\partial f}{\partial z} \vec{e}_z \\ &= \frac{\partial f}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \vec{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi \\ &= \frac{\partial f}{\partial \rho} \vec{e}_\rho + \frac{1}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi + \frac{\partial f}{\partial z} \vec{e}_z \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{F} &= \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 F_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta F_\theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi} \\ &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho F_\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{F} &= \left(\frac{\partial F_z}{\partial y} - \frac{\partial F_y}{\partial z} \right) \vec{e}_x + \left(\frac{\partial F_x}{\partial z} - \frac{\partial F_z}{\partial x} \right) \vec{e}_y + \left(\frac{\partial F_y}{\partial x} - \frac{\partial F_x}{\partial y} \right) \vec{e}_z \\ &= \frac{1}{r \sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta F_\varphi) - \frac{\partial F_\theta}{\partial \varphi} \right) \vec{e}_r + \frac{1}{r} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial F_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial}{\partial r} (r F_\varphi) \right) \vec{e}_\theta \\ &\quad + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} (r F_\theta) - \frac{\partial F_r}{\partial \theta} \right) \vec{e}_\varphi \\ &= \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial F_z}{\partial \varphi} - \frac{\partial F_\varphi}{\partial z} \right) \vec{e}_\rho + \left(\frac{\partial F_\rho}{\partial z} - \frac{\partial F_z}{\partial \rho} \right) \vec{e}_\varphi + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} (\rho F_\varphi) - \frac{\partial F_\rho}{\partial \varphi} \right) \vec{e}_z \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta f &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \\ &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial f}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}. \end{aligned}$$

Legendre-ovi polinomi

LEGENDRE-OVI POLINOMI $P_n(x)$ su rešenja Legendre-ove diferencijalne jednačine

$$(1-x^2)y'' - 2xy' + n(n+1)y = 0 \quad (4.110)$$

za celobrojne pozitivne vrednosti n . Važi

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2-1)^n. \quad (4.111)$$

Legendre-ovi polinomi su parne ili neparne funkcije.

FUNKCIJA GENERATRISA:

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xr+r^2}} = \begin{cases} \sum P_n(x) r^n, & |r| < \min|x \pm \sqrt{x^2-1}| \\ \sum P_n(x) \frac{1}{r^{n+1}}, & |r| > \max|x \pm \sqrt{x^2-1}| \end{cases} \quad (4.112)$$

SPECIJALNE VREDNOSTI:

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1, & P_2(x) &= \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}, \\ P_1(x) &= x, & P_3(x) &= \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x. \end{aligned} \quad (4.113)$$

POSEBNE VREDNOSTI:

$$P_n(1) = 1, \quad P_{2n}(0) = (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2n!!} \quad (4.114)$$

REKURENTNE RELACIJE:

$$nP_n(x) + (n-1)P_{n-2}(x) - (2n-1)xP_{n-1}(x) = 0. \quad (4.115)$$

RELACIJE ORTOGONALNOSTI:

$$\int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm}. \quad (4.116)$$

Sferni harmonici

SFERNI HARMONICI su definisani sa

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad (4.117)$$

specijalno,

$$Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta). \quad (4.118)$$

POSEBNE VREDNOSTI:

$$\begin{aligned}
 l=0: \quad Y_0^0 &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
 l=1: \quad Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \\
 Y_1^{\pm 1} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi} \\
 l=2: \quad Y_2^0 &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1) \\
 Y_2^{\pm 1} &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\varphi} \\
 Y_2^{\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}
 \end{aligned} \tag{4.119}$$

RELACIJE ORTOGONALNOSTI:

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) \sin\theta \, d\theta \, d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \tag{4.120}$$

POSEBNE FORMULE: ako su \vec{r}_1 i \vec{r}_2 dva vektora koji zaklapaju ugao γ , važi

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\gamma}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} P_l(\cos\gamma) \tag{4.121}$$

$$P_l(\cos\gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta_1, \varphi_1) Y_l^m(\theta_2, \varphi_2) \tag{4.122}$$

Laguerre-ovi polinomi

LAGUERRE-OVI POLINOMI su rešenja jednačine

$$xy'' + (\alpha + 1 - x)y' + ny = 0 \tag{4.123}$$

gde su n celi nenegativni brojevi, a α proizvoljan kompleksni broj. Mogu se izraziti preko elementarnih funkcija kao

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{e^x x^{-\alpha}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\alpha}). \tag{4.124}$$

Specijalno,

$$L_n(x) = L_n^{(0)}(x). \tag{4.125}$$

FUNKCIJA GENERATRISA:

$$e^{-xt}(1+t)^\alpha = \sum L_n^{(\alpha-n)}(x) t^n, \quad |t| < 1. \tag{4.126}$$

SPECIJALNE VREDNOSTI:

$$\begin{aligned}
 L_0(x) &= 1, & L_2(x) &= 1 - 2x + \frac{1}{2}x^2, \\
 L_1(x) &= 1 - x, & L_3(x) &= 1 - 3x + \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{6}x^3.
 \end{aligned} \tag{4.127}$$

REKURENTNE RELACIJE:

$$nL_n^{(\alpha)}(x) = (2n + \alpha - 1 - x)L_{n-1}^{(\alpha)}(x) - (n + \alpha - 1)nL_{n-2}^{(\alpha)}(x) \quad (4.128)$$

$$x \frac{dL_n^{(\alpha)}(x)}{dx} = nL_n^{(\alpha)}(x) - (n + \alpha)L_{n-1}^{(\alpha)}(x) = -xL_{n-1}^{(\alpha+1)}(x). \quad (4.129)$$

RELACIJE ORTOGONALNOSTI:

$$\int_0^{+\infty} x^\alpha e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha)}(x) dx = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!} \delta_{mn}. \quad (4.130)$$

ADICIONE FORMULE:

$$L_n^{(\alpha)}(x + y) = e^y \sum_0^n \frac{(-1)^k}{k!} y^k L_n^{(\alpha+k)}(x) \quad (4.131)$$

4.7 Zadaci

4.1 Polazeći od komutacionih relacija između koordinata i impulsa pokazati da važi (4.4).

4.2 Pokazati da je $\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar\vec{L}$.

4.3 Polazeći od $L_i = \varepsilon_{ijk}x_j p_k$ pokazati da je

$$L^2 = L_i L_i = \vec{r}^2 \vec{p}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})(\vec{r} \cdot \vec{p}) + i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p}$$

4.4 Pokazati da je

$$[L_i, x_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k, \quad [L_i, p_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} p_k.$$

4.5 Odrediti komutator $[L_x^2, y]$.

4.6 Koristeći osnovne komutacione relacije između komponenti momenta impulsa $[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k$ pokazati da je

a) $[L^2, L_i] = 0;$

b) $[L_z, L_{\pm}] = \pm\hbar L_{\pm}, \quad [L_+, L_-] = 2\hbar L_z;$

c) $L^2 = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z = L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z.$

Ovde su $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$ operatori podizanja i spuštanja komponente momenta impulsa i L^2 je kvadrat momenta impulsa.

4.7 Neka su \vec{A}, \vec{B} i \vec{C} vektorski operatori. Pokazati da je

a) $\vec{A} \cdot \vec{B} = \vec{B} \cdot \vec{A} + [A_i, B_i];$

b) $(\vec{A} \times \vec{B})_i = -(\vec{B} \times \vec{A})_i + \varepsilon_{ijk} [A_j, B_k];$

c) $\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{C};$

d) $(\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}))_i = B_i (\vec{A} \cdot \vec{C}) - (\vec{A} \cdot \vec{B}) C_i + [A_j, B_i] C_j.$

4.8 Pretpostavimo da je A operator koji zadovoljava

$$L^2 A = \alpha A, \quad L_z A = \beta A,$$

gde su α i β neki kompleksni brojevi. Pokazati da tada važi i

$$L^2 L_{\pm} A = \alpha L_{\pm} A, \quad L_z L_{\pm} A = (\beta \pm \hbar) L_{\pm} A.$$

4.9 Ako je \vec{A} vektorski operator, $[L_i, A_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} A_k$, pokazati da je

$$[L^2, \vec{A}] = 2i\hbar (\vec{A} \times \vec{L} - i\hbar \vec{A}).$$

(Može se koristiti identitet $\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijl} = 2\delta_{kl}$).

4.10 Neka su \vec{A} i \vec{B} vektorski operatori koji komutiraju između sebe i sa momentom impulsa ($[A_i, B_j] = 0$, $[A_i, L_j] = 0$ i $[B_i, L_j] = 0$). Pokazati da je

$$[\vec{A} \cdot \vec{L}, \vec{B} \cdot \vec{L}] = i\hbar (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{L}.$$

4.11 Izvesti formulu (4.15):

- a) polazeći od formule $L^2 = L_-L_+ + L_z^2 + \hbar L_z$. Paziti pri tome da npr. $\text{ctg}\theta$ i $\partial/\partial\theta$ ne komutiraju!
- b) pišući izraz iz prethodnog zadatka u sfernim koordinatama.

4.12 Pokazati da je

$$\vec{p}^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$$

gde je p_r operator koji treba odrediti. Potom naći komutator $[r, p_r]$.

4.13 Izračunati funkciju $Y_l^l(\theta, \varphi)$ iz uslova $L_+ Y_l^l = 0$ (videćemo u sledećoj glavi da je ovo tačno) prikazujući L_+ u koordinatnoj reprezentaciji. Uzimajući da je moguće razdvojiti promenljive $Y_l^l(\theta, \varphi) = T_l(\theta) e^{il\varphi} / \sqrt{2\pi}$ odrediti funkcije $T_l(\theta)$.

4.14 Za koje vrednosti parametara α , β i γ je funkcija

$$f(\theta, \varphi) = \cos^\alpha \theta \sin^\beta \theta e^{i\gamma\varphi},$$

svojevrsna za operatora L^2 ? Razmatrati slučajeve u kojima su α i β prirodni brojevi, dok je γ ceo broj.

4.15 Naći operatore podizanja i spuštanja z -komponente momenta impulsa $L_\pm = L_x \pm iL_y$ u cilindričnim koordinatama.

4.16 Koristeći Rodrigues-ovu formulu (4.31) izračunati prva četiri Legendre-ova polinoma, a onda pokazati ortogonalnost $P_1(\xi)$ i $P_3(\xi)$.

4.17 Odrediti asociirane Legendre-ove funkcije $P_l^m(x)$ za $l = 0$, $l = 1$ i $l = 2$.

4.18 Napisati sferne harmonike za $l = 1$ i $l = 2$ u Descartes-ovim koordinatama

4.19 Pokazati da operatori L^2 i L_z komutiraju sa sferno-simetričnim hamiltonijanom (4.40).

4.20 Talasna funkcija čestice je

$$\psi(x, y, z) = K(x + iy + z) e^{-\alpha\sqrt{x^2+y^2+z^2}},$$

gde je $\alpha > 0$ poznata konstanta.

- a) Normirati talasnu funkciju.
- b) Naći očekivane vrednosti $\langle L^2 \rangle$ i $\langle L_z \rangle$ u ovom stanju.
- c) Kolika je verovatnoća da će se prilikom merenja L_z dobiti rezultat \hbar ?
- 4.21 Neka je $\psi(\varphi)$ talasna funkcija koja zavisi samo od koordinate φ . Pokazati da je

$$\psi(\varphi + \alpha) = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha L_z} \psi(\varphi).$$

Ovde je α konstanta.

4.22 Unsöld-ova teorema kaže da popunjene ili polupopunjene ljuske ne doprinose ukupnom momentu impulsa atoma. Drugim rečima, to znači da je talasna funkcija popunjenih ili nepopunjenih ljusaka sferno-simetrična. Pokazati da je to tačno za L i M ljuske, odnosno izračunati

$$\sum_{m=-l}^l |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2$$

za $l = 1$ i $l = 2$ i uveriti se da izraz ne zavisi od θ i φ .

4.23 Nacrtati efektivnu potencijalnu energiju elektrona $U_{\text{eff}}(r)$ u atomu vodonika za različite vrednosti l .

4.24 Dve jednake čestice mase M povezane su bezmasenim štapićem dužine a . Sistem rotira u:

- a) tri dimenzije (kruti rotator);
- b) ravni (rotator s fiksnom osom).

Odrediti svojstvene vrednosti energije, funkcije stanja i degeneracije energetskih nivoa za oba sistema. Energije napisati preko momenta inercije sistema $I = Ma^2/2$

4.25 Potencijalna energija čestice mase m je

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < a \\ \infty, & r > a \end{cases}.$$

Rešiti stacionarnu Schrödinger-ovu jednačinu:

- a) pod pretpostavkom da su rešenja sferno-simetrična tj. da je $l = 0$;
- b) za $l > 0$.

4.26 Sferno-simetrična barijera određuje kretanje čestice mase m :

$$U(r) = \begin{cases} -U, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}.$$

Naći jednačinu za energiju osnovnog stanja. Naći uslov da bi postojalo bar jedno vezano stanje.

4.27 Rešiti vremenski nezavisnu Schrödinger-ovu jednačinu harmonijskog oscilatora u dve dimenzije u koordinatnoj reprezentaciji i u bazu svojstvenih stanja hamiltonijana $|n_x, n_y\rangle$. Prodiskutovati degeneraciju hamiltonijana i pokazati da hamiltonijan zajedno za L_z čini kompletni skup opservabli. Ako su bazisna stanja $|nm\rangle$ pri čemu je

$$H|nm\rangle = E_n|nm\rangle, \quad L_z|nm\rangle = \hbar m|nm\rangle$$

napisati ova stanja u cilindričnim koordinatama za osnovno i prvo pobuđeno stanje i ustanoviti vezu sa bazisom u kome su stanja opisana kvantnim brojevima energije jednodimenzionih oscilatora.

4.28 Položaj i impuls protona i elektrona u atomu vodonika su redom \vec{X}_p i \vec{P}_p odnosno \vec{X}_e i \vec{P}_e . Ako se uvedu položaj centra mase i relativne čestice

$$\vec{R} = \frac{m_p \vec{X}_p + m_e \vec{X}_e}{m_p + m_e}, \quad \vec{r} = \vec{X}_e - \vec{X}_p,$$

pokazati da su konjugovani impulsi

$$\vec{P}_{\vec{R}} = \vec{P} = \vec{P}_p + \vec{P}_e, \quad \vec{P}_{\vec{r}} = \vec{p} = \frac{m_p \vec{P}_e - m_e \vec{P}_p}{m_p + m_e},$$

gde su $\vec{P}_p = m_p \dot{\vec{X}}_p$ i $\vec{P}_e = m_e \dot{\vec{X}}_e$. Odrediti komutatore $[(\vec{R})_i, (\vec{P})_j]$, $[(\vec{R})_i, (\vec{p})_j]$ i $[(\vec{r})_i, (\vec{P})_j]$.

4.29 U ovom zadatku pokazaćemo da su funkcije (4.76) rešenja radijalnog dela Schrödinger-ove jednačine za atom vodonika. To ćemo postići u nekoliko koraka.

- a)** Pokazati da se diferencijalna jednačina za radijalni deo Schrödinger-ove jednačine atoma vodonika (4.58) može napisati u bezdimenzionom obliku

$$u''(x) + \left(-\frac{1}{4} + \frac{2m_e Z e^2}{\hbar^2} \frac{1}{x} - l(l+1) \frac{1}{x^2} \right) u(x) = 0,$$

gde je $x = r\epsilon$ pri čemu je

$$-\frac{2m_e Z e^2}{\epsilon \hbar^2} = \left(\frac{\epsilon}{2} \right)^2.$$

- b)** Razmotriti diferencijalnu jednačinu

$$y''(x) + \left(-\frac{1}{4} + \frac{2j+k+1}{2} \frac{1}{x} - \frac{k^2-1}{4} \frac{1}{x^2} \right) y(x) = 0.$$

Pokazati da se ova jednačina pojednostavljuje ako rešenje tražimo u obliku

$$y(x) = e^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{k+1}{2}} f(x),$$

i identifikovati funkcije $f(x)$.

- c)** Uporediti diferencijalne jednačine za $y(x)$ iz dela **b)** i $u(x)$ iz dela **a)** ovog zadatka i naći rešenje bezdimenzionone radijalne Schrödinger-ove jednačine za atom vodonika.
- d)** Odrediti spektar i funkcije stanja jednačine (4.58).

4.30 Nacrtati radijalne delove talasne funkcije $R_{nl}(r)$ i radijalnu gustinu verovatnoće $r^2 R_{nl}(r)^2$ atoma vodonika za $n = 1$ i $n = 2$.

4.31 Uporediti četiri karakteristična rastojanja u atomskoj fizici: Compton-ovu talasnu dužinu, Bohr-ov radijus, tipičnu talasnu dužinu prelaza između dva nivoa u atomu i klasični radijus elektrona $r \sim e^2 / (m_e c^2)$.

4.32 Odrediti udaljenost na kojoj je radijalna gustina verovatnoće u osnovnom stanju atoma vodonika maksimalna.

4.33 Izračunati $\langle r \rangle$ i Δr u n -tom svojstvenom stanju maksimalnog momenta impulsa atoma vodonika. Da li su orbite bolje definisane za stanja sa manjom ili sa većom energijom?

4.34 Odrediti očekivane vrednosti $\langle r^2 \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle y^2 \rangle$ i $\langle z^2 \rangle$ za elektron u atomu vodonika koji je

- a)** u osnovnom stanju;
- b)** u stanju $\psi_{210}(r, \theta, \varphi)$.

4.35* Paraboličke koordinate (ξ, η, φ) definisane su sa

$$\xi = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} + z, \quad \eta = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} - z, \quad \varphi = \arctan \frac{y}{x}.$$

- a)** Pokazati da se Descartes-ove koordinate izražavaju preko paraboličnih na sledeći način:

$$x = \sqrt{\xi\eta} \cos \varphi, \quad y = \sqrt{\xi\eta} \sin \varphi, \quad z = \frac{\xi - \eta}{2}.$$

- b) Napisati stacionarnu Schrödinger-ovu jednačinu za elektron u atomu vodonika u paraboličkim koordinatama.
- c) Pokazati da se u jednačini dobijenoj u prethodnom delu zadatka može izvršiti razdvajanje promenljivih $\psi(\xi, \eta, \varphi) = X(\xi)Y(\eta)F(\varphi)$. Odrediti funkcije $X(\xi)$, $Y(\eta)$ i $F(\varphi)$ i naći spektar energije vezanih stanja atoma vodonika.

4.36 Čestica mase m se kreće u ravni po krugu poluprečnika a . Pokazati da je hamiltonijan ovog sistema isti kao kod rotatora s fiksnom osom (zadatak 4.24 b))

- a) Naći svojstvena stanja i svojstvene energije ove čestice.
- b) Odrediti svojstvena stanja i spektar ako je čestica tačkasto naelektrisanja e postavljeno u elektromagnetno polje potencijala

$$\vec{A} = \frac{Br}{2} \vec{e}_\varphi.$$

4.37 Čestica mase m i naelektrisanja e nalazi se u homogenom električnom polju \vec{E} .

- a) Napisati vremenski zavisnu Schrödinger-ovu jednačinu za ovaj sistem.
- b) Pokazati da očekivana vrednost položaja u stanju $\psi(x, t)$ zadovoljava

$$m \frac{d^2 \langle \vec{r} \rangle}{dt^2} = e \vec{E}.$$

4.38 Čestica mase m i naelektrisanja e nalazi se u homogenom električnom $\vec{E} = E \vec{e}_x$ i magnetnom polju $\vec{B} = B \vec{e}_z$ pri čemu je $E < B$. Naći rešenja Schrödinger-ove jednačine za ovu česticu.

4.39* Čestica mase m i naelektrisanja e kreće se u ravni normalnoj na magnetno polje $\vec{B} = B \vec{e}_z$.

- a) Razmotrimo kretanje čestice u gejdžu u kome je $\vec{A} = (-By, 0, 0)$. Pokazati da se čestica kreće kao harmonijski oscilator i odrediti svojstvena stanja i spektar energije.
- b) Pokazati da šimetričan gejdž $\vec{A} = (-By/2, Bx/2, 0)$ opisuje istu fizičku situaciju.
- c) Napisati hamiltonijan i Schrödinger-ovu jednačinu u simetričnom gejdžu.
- d) Napisati Schrödinger-ovu jednačinu iz prethodnog dela zadatka preko koordinata

$$X = \sqrt{\frac{eB}{2\hbar c}} x, \quad Y = \sqrt{\frac{eB}{2\hbar c}} y,$$

u bezdimenzionnoj formi.

- e) Uvedimo kompleksne koordinate

$$z = X + iY, \quad z^* = X - iY.$$

Pokazati da su odgovarajući izvodi

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial X} - i \frac{\partial}{\partial Y} \right), \quad \frac{\partial}{\partial z^*} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial X} + i \frac{\partial}{\partial Y} \right).$$

f) Uveriti se da je

$$\left[z, \frac{\partial}{\partial z} \right] = \left[z^*, \frac{\partial}{\partial z^*} \right] = -1, \quad \left[z, \frac{\partial}{\partial z^*} \right] = \left[z^*, \frac{\partial}{\partial z} \right] = 0.$$

g) Pokazati da se hamiltonijan iz dela pod d) može prikazati preko kreacionih i anihilacionih operatora

$$a^\dagger = \sqrt{2} \left(-\partial_{z^*} + \frac{z}{2} \right), \quad a = \sqrt{2} \left(\partial_z + \frac{z^*}{2} \right).$$

i da oni zadovoljavaju komutacione relacije $[a, a^\dagger] = 1$. Odrediti osnovno stanje.

h) Pokazati da postoji još jedan par kreacionog i anihilacionog operatora

$$b^\dagger = \sqrt{2} \left(-\partial_z + \frac{z^*}{4} \right), \quad b = \sqrt{2} \left(\partial_{z^*} + \frac{z}{4} \right),$$

koji zadovoljavaju komutacionu relaciju $[b, b^\dagger] = 1$. Napisati operator L_z preko kreacionih i anihilacionih operatora.

SIMETRIJE

Mada bi po logici smenjivanja matematičkih i fizičkih poglavlja sadržaj ove glave trebalo da bude pretežno matematički, nije tako. Naslov je tu zbog svoje kratkoće; u ovoj glavi uvode se neki od fundamentalnih pojmova koji su u fiziku ušli sa kvantnom mehanikom, između ostalih, spin i identičnost čestica.

Moglo bi se reći da smo sa razumevanjem simetrija u kvantnoj mehanici, kao u kompjuterskoj igrici, prešli na novi nivo¹. I u klasičnoj fizici simetrije su veoma važne jer njihovo poznavanje uvek pojednostavljuje rešavanje fizičkog problema. Ali u kvantnoj mehanici shvatili smo da simetrija može da bude prisutna i kada nije reprezentovana na očigledan način, ili matematički preciznije, u prirodnoj reprezentaciji. Zbog toga, na primer, teorija ugaonog momenta predstavlja veoma značajan deo kvantne mehanike i dala je veliki doprinos objašnjenju spektara kroz selekciona pravila; ali uopštenje ugaonog momenta na polucele reprezentacije dovelo je (ili je moglo dovesti) do teorijske predikcije spina $1/2$. Slično je, nešto kasnije, ideja o postojanju konjugacije naboja dovela Dirac-a do predikcije pozitrona, antičestice elektrona. I pojam unutrašnje simetrije faktički je potekao iz kvantne mehanike: on je omogućio da se napravi klasifikacija elementarnih čestica i odredi njihova struktura bez poznavanja detalja dinamike. Navedimo dalje gradijentne simetrije koje su u modernoj fizici ključne za razumevanje i opis fundamentalnih interakcija u prirodi.

Kada govorimo o simetrijama ili o simetriji, podrazumevamo u stvari dva pojma. I u fizici i u svakodnevnom govoru simetrija podrazumeva *invarijantnost* nekog objekta (na primer umetničke slike ili građevine, živog bića, kristala, ali i dejstva ili operatora) na određenu transformaciju ili skup transformacija. I u umetnosti i u fizici smatramo da objekti koji poseduju simetriju imaju posebnu (estetsku, konceptualnu) vrednost. U fizici se koristi i drugi pojam koji se odnosi na fizičke zakone i jednačine koje ih opisuju: *kovarijantnost*. Kovarijantnost obično znači da fizički zakoni "izgledaju isto" u različitim koordinatnim ili referentnim sistemima i daje nam grupu simetrija određenog zakona fizike (koja je, razume se, nađena ili potvrđena u eksperimentu). Na primer, drugi Newton-ov zakon se ne menja "pri rotacijama i translacijama, tj. pri ovim transformacijama leva i desna strana jednačine (1.1) transformišu se na isti način, usklađeno ili ko-varijantno: kao vektori. To znači da drugi Newton-ov zakon važi bez obzira kako

¹Od mnogo referenci za teoriju Lie-jevih grupa u kojima su analizirani razni aspekti simetrije i njene primene u fizici izdvajamo R. Gilmore, *Lie groups, Physics, and Geometry*, Cambridge University Press, 2008. i B. G. Wybourne, *Classical groups for Physicists*, Wiley, 1974.

usmerimo naše lenjire i gde postavimo (koordinatni početak) naše laboratorije. Jednačina (1.1) ne menja se zapravo ni pri Galilei-jevim transformacijama, pa drugi Newton-ov zakon važi, odnosno izgleda isto, u svim inercijalnim sistemima. Slično je i sa Maxwell-ovim jednačinama. Njihova kovarijantnost na Lorentz-ove transformacije može se videti i iz jednačina (1.21-1.24), ali postaje manifestna kada se uvedu kovarijantne veličine, četvorovektori i tenzori: vektorski potencijal A_μ , struja j_μ i tenzor jačine polja $F_{\mu\nu}$. Maxwell-ove jednačine se tada zapisuju kao

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \frac{4\pi}{c} j^\nu, \quad (5.1)$$

ili u Lorentz-ovom gejdžu, $\partial_\mu A^\mu = 0$,

$$\square A^\nu = \frac{4\pi}{c} j^\nu, \quad (5.2)$$

gde je $\square = \partial_\mu \partial^\mu$ d'Alembert-ov operator. Važno je naglasiti da iako same fizičke veličine (na primer vektor položaja, potencijal elektromagnetnog polja) nisu invarijantne na transformacije simetrije, njihova promena pri prelazu iz jednog u drugi referentni sistem je fiksirana, zadata. Zbog toga kad rešavamo fizički problem, referentni sistem možemo da fiksiramo onako kako nam je najpogodnije: rešenje uvek umemo da prebacimo u proizvoljni drugi sistem.

Ovde ćemo razmatrati oba aspekta simetrije: invarijantnost konkretnog kvantnog sistema na određenu grupu simetrije, u ovoj glavi, i kovarijantnost tj. opšte simetrije Schrödinger-ove jednačine, u sledećoj.

5.1 Simetrije i zakoni održanja

Poseban značaj simetrija se u fizici vidi kroz Noether-inu teoremu koja kaže: svakom parametru neprekidne grupe simetrije dejstva klasičnog sistema odgovara jedna održana veličina odnosno jedan integral kretanja. Integrali kretanja su one veličine koje se ne menjaju sa vremenom.

Klasično, dinamički uslovi da neka veličina ne zavisi od vremena mogu se formulirati i u Lagrange-ovom i u Hamilton-ovom formalizmu. U Lagrange-evom formalizmu konstante kretanja postoje kada imamo ciklične koordinate odnosno koordinate od kojih lagranžijan ne zavisi eksplicitno. Ako je x_i ciklična koordinata, iz jednačina kretanja imamo

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = 0, \quad (5.3)$$

pa je odgovarajući generalisani impuls $p_i = \partial L / \partial \dot{x}_i$ konstanta. Sa druge strane, ako $L \neq L(x_i)$, generalisana translacija

$$x_i \rightarrow x_i + a, \quad \dot{x}_i \rightarrow \dot{x}_i \quad (5.4)$$

očigledno ne menja ni lagranžijan ni dejstvo (1.4). U Hamilton-ovom formalizmu, iz jednačine kretanja vidi se da je opservabla A konstanta kretanja ako je njena Poisson-ova zagrada sa hamiltonijanom nula,

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\}_{PZ} = 0. \quad (5.5)$$

U kvantnoj mehanici *integrali kretanja* se slično definišu: to su one opservable čije se očekivane vrednosti ne menjaju u toku vremena. Iz Ehrenfest-ove teoreme (3.129) zaključujemo da takve opservable komutiraju sa hamiltonijanom. Dakle, uslov

$$[A, H] = 0 \quad (5.6)$$

je definicija integrala kretanja u kvantnoj mehanici. Iz ove definicije se vidi da su svojstvena stanja konstanti kretanja stacionarna, tj. ako je $A|a\rangle = a|a\rangle$, onda je i

$$A|a, t\rangle = A e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |a\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} A |a\rangle = a e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |a\rangle = a |a, t\rangle. \quad (5.7)$$

To između ostalog znači da su kvantni brojevi konstanti kretanja dobri za karakterizaciju sistema jer se njihova vrednost ne menja u toku vremena.

Da bismo matematički precizno definisali simetrije, treba nam pojam transformacije sistema: to je bilo kakva, ne nužno geometrijska operacija zadana na elementima ili na parametrima koji opisuju fizički sistem. Možda je najlakše poći od *transformacija prostora* koje se definišu kao preslikavanja koordinata:

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}'(\vec{r}, t; a_i), \quad t \rightarrow t'(\vec{r}, t; a_i). \quad (5.8)$$

Prostorne transformacije mogu da se realizuju na dva načina: ili se sve tačke prostora transformišu (transliraju, rotiraju) a objekti u njemu tj. referentni sistem ne, ili je prostor fiksiran a transformišemo referentni sistem. Ove dve varijante zovu se aktivna i pasivna interpretacija.

Intuitivno, simetrije prostora su transformacije koje ne menjaju njegove osobine². Prvo ćemo razmatrati *izometrije*, transformacije koje čuvaju rastojanja i uglove. One imaju strukturu *grupe*: grupu transformacija ćemo označavati sa G , a njene elemente sa g ili g_a . U matematici, grupa ima osobine koje intuitivno očekujemo od "prelaza" iz jednog u drugi referentni sistem: zatvorenost tj. mogućnost uzastopnih transformacija, i postojanje identične i inverzne transformacije. Precizna definicija grupe data je u dodatku. U kvantnoj mehanici, u kontekstu veze između simetrija i integrala kretanja koju smo pomenuli na početku, posebno su važne Lie-jeve grupe. *Lie-jeva grupa* je grupa sa beskonačno mnogo elemenata koji se mogu parametrizovati realnim brojevima a_i , $i = 1, 2, \dots, n$. Može se pokazati da parametrizacija ima oblik eksponencijalne funkcije³

$$g_a = e^{-i \sum a_i T_i}, \quad (5.9)$$

gde su sa T_i označeni *generatori* grupe. Generatori zadaju dejstvo grupe u okolini jediničnog elementa: za male vrednosti $a_i = \epsilon_i$, (5.9) se može razviti u Taylor-ov red,

$$g_\epsilon = 1 - i \sum \epsilon_i T_i, \quad T_i = i \left. \frac{\partial g_a}{\partial a_i} \right|_{a_i=0}. \quad (5.10)$$

Važan pojam u teoriji grupa i u primenama je reprezentacija grupe, $U(g)$. *Reprezentacija* je preslikavanje koje čuva strukturu grupe tj. zakon množenja,

$$U(g_a)U(g_b) = U(g_a g_b). \quad (5.11)$$

Veza (5.9) između generatora i elemenata grupe važi po pravilu i u reprezentaciji,

$$U(g_a) = e^{-i \sum a_i \tau_i}, \quad U(g_\epsilon) = 1 - i \sum \epsilon_i \tau_i, \quad (5.12)$$

gde sada umesto T_i figurišu $U(T_i) = \tau_i$.

Videli smo da se grupe prostornih transformacija zadaju delovanjem na koordinate, (5.8), što ih u stvari i definiše. Ta reprezentacija se naziva *prirodna reprezentacija*. Međutim u kvantnoj mehanici čestica nije opisana vektorom položaja već stanjem $|\psi\rangle$, koje se pri transformaciji koordinata takođe menja (što je očigledno u koordinatnoj reprezentaciji gde je $\psi(x)$ talasna

²Iz opšte teorije relativnosti znamo da prostor odnosno prostor-vreme nije apstraktni, nepromenljivi matematički okvir već dinamička struktura uslovljena kretanjem materije: zato je pitanje osobina prostora, eksperimentalno pitanje.

³U najopštijem slučaju, element grupe je proizvod eksponencijalnih faktora.

funkcija). Pošto da je kvantnomehantički opis tj. zakon kretanja linearan, i odgovarajuća transformacija je opisana linearnim operatorom,

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = U(g)|\psi\rangle. \quad (5.13)$$

Uz to zahtevamo da rezultujuće stanje $|\psi'\rangle$ bude fizičko, tj. vektor jedinične dužine kao i $|\psi\rangle$. To znači da su $U(g)$ *unitarni operatori*,

$$U(g)U^\dagger(g) = I, \quad (5.14)$$

i naravno, čine reprezentaciju odgovarajuće grupe. U stvari, formalizam daje nešto više slobode. Iz činjenice da su opservabilne veličine kao što su gustina i fluks verovatnoće, ili očekivane vrednosti, bilinearne (kvadratne) po talasnoj funkciji, sledi da se transformacije prostora mogu reprezentovati i kao *antiunitarni* (unitarni i antilinearni) operatori za koje važi

$$U(c|\psi\rangle + d|\chi\rangle) = c^*U|\psi\rangle + d^*U|\chi\rangle. \quad (5.15)$$

Osim toga, reprezentacija ne mora biti prava nego može biti i *projektivna*, odnosno reprezentacija "do na fazni faktor",

$$U(g_a)U(g_b) = e^{i\omega_{ab}}U(g_ag_b). \quad (5.16)$$

Ovo je sadržaj *Wigner-ove teoreme o simetrijama*.

Delovanje operatora $U(g)$ može se, kao i u slučaju dinamike, sa vektora stanja "prebaciti" na opservable. Drugim rečima, možemo uzeti da su pri transformacijama simetrije stanja invarijantna a da se opservable menjaju,

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = |\psi\rangle, \quad A \rightarrow A' = U^{-1}(g)AU(g). \quad (5.17)$$

Vratimo na vezu između simetrija i zakona održanja. Pretpostavimo da imamo fizički sistem invarijantan na Lie-jevu grupu simetrije koja je u reprezentaciji zadata operatorima $U(g_a)$. Karakteristika sistema je njegov hamiltonijan, pa *invarijantnost sistema* znači da se pri transformacijama grupe simetrije hamiltonijan ne menja,

$$U^{-1}(g_a)HU(g_a) = H, \quad HU(g_a) = U(g_a)H. \quad (5.18)$$

Pošto su $U(g_a)$ generisani generatorima τ_i , poslednji uslov je ekvivalentan sa

$$[H, \tau_i] = 0. \quad (5.19)$$

Prema tome, G je grupa simetrije sistema ako svi njeni generatori komutiraju sa hamiltonijanom, odnosno, *generatori simetrije su konstante kretanja*. Ovo je kvantnomehantička verzija Noether-ine teoreme.

Postojanje simetrije po pravilu objašnjava degeneraciju svojstvenih vrednosti energije. Pošto generatori τ_i komutiraju sa hamiltonijanom, njihovo dejstvo na svojstveno stanje energije ne menja njenu vrednost. τ_i , međutim, mogu da promene samo stanje, odnosno da preslikaju jedan svojstveni vektor energije u drugi (za istu svojstvenu vrednost). Prema tome, ceo *multiplet stanja* koja se dobijaju delovanjem τ_i na neko svojstveno stanje energije ima istu tu vrednost energije, pa je energija degenerisana.

5.2 Prostorne simetrije u kvantnoj mehanici

Najvažnije transformacije prostora, translacije i rotacije, definisane su u dodatku, a u ovom poglavlju naći ćemo njihovu reprezentaciju u kvantnoj mehanici. Kasnije ćemo videti da smo time zapravo dokazali kovarijantnost Schrödinger-ove jednačine na ove transformacije.

U principu možemo da postupimo na dva načina. Jedna mogućnost je da, na osnovu analogije između talasne funkcije i klasičnog polja, pretpostavimo da se pri translacijama i rotacijama talasna funkcija $\psi(\vec{r}, t)$ transformiše kao skalarno polje⁴. Zakon promene klasičnog polja pri translacijama i rotacijama zadat je na skoro očigledan, u svakom slučaju veoma intuitivan način. Pretpostavimo da imamo neko skalarno polje, na primer polje temperature $T(\vec{r}, t)$. Pri prelazu iz jednog u drugi referentni sistem, $\vec{r} \rightarrow \vec{r}'$, $t \rightarrow t'$, $T \rightarrow T'$, funkcija polja se transformiše kao

$$T'(\vec{r}', t') = T(\vec{r}, t), \quad \text{tj.} \quad T'(\vec{r}, t) = T(R^{-1}(\vec{r} - \vec{a}), t). \quad (5.20)$$

Ova formula u stvari znači da je izmerena brojna vrednost temperature u određenoj tački prostora ista, bez obzira da li tu tačku prikazujemo u starom ili u novom referentnom sistemu. Druga mogućnost da nađemo reprezentaciju je da posmatramo delovanje prostornih transformacija na operatore položaja i impulsa, i da zahtevamo da se oni transformišu na isti način kao odgovarajuće klasične veličine. Videćemo da se oba pristupa svode na isto.

Označimo operator koji reprezentuje *inverziju prostora* sa Π . Ako pretpostavimo da se talasna funkcija ponaša kao skalarno polje, imamo

$$\Pi\psi(\vec{r}) = \psi(P^{-1}\vec{r}) = \psi(-\vec{r}). \quad (5.21)$$

Jasno, kao i za P , i za Π važi $\Pi^2 = I$: $\Pi^2\psi(\vec{r}) = \Pi\psi(-\vec{r}) = \psi(\vec{r})$. Svojevredne vrednosti operatora Π koji je, lako se vidi, unitaran i hermitski, su ± 1 , a odgovarajuće svojevredne funkcije

$$\Pi\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}) = \pm\psi(\vec{r}) \quad (5.22)$$

su parne ili neparne funkcije. Zato se inverzija prostora naziva još i *parnost*.

Možemo da proverimo kako ovako definisano Π deluje na operator koordinate. Jednačina (5.21) je, u Dirac-ovoj notaciji,

$$\langle \vec{r}' | \Pi | \psi \rangle = \langle -\vec{r}' | \psi \rangle \quad (5.23)$$

i pošto važi za svako stanje $|\psi\rangle$ znači da je

$$\Pi | \vec{r} \rangle = | -\vec{r} \rangle. \quad (5.24)$$

Prema tome,

$$\Pi \hat{r} \Pi | \vec{r} \rangle = \Pi \hat{r} | -\vec{r} \rangle = -\Pi \vec{r} | -\vec{r} \rangle = -\vec{r} | \vec{r} \rangle, \quad (5.25)$$

(u ovoj jednačini smo pisali kapicu nad operatorom \hat{r} da bismo ga razlikovali od njegove svojevredne vrednosti \vec{r}), pa imamo

$$\hat{r}' = \Pi^{-1} \hat{r} \Pi = \Pi \hat{r} \Pi = -\hat{r}. \quad (5.26)$$

Operator koordinate se transformiše kako treba, kao vektor položaja, (5.227).

Razmotrimo sada kako se reprezentuju *translacije*. Videli smo da translacije čine troparametarsku Lie-jevu grupu: označimo

$$U(\vec{a}) = e^{-i a_i \tau_i}, \quad (5.27)$$

⁴ Ova pretpostavka u stvari nije uvek tačna, važi samo kada čestica ima spin nula.

τ_i su grupni generatori u reprezentaciji. Odredimo τ_i pretpostavljajući da se talasna funkcija pri translacijama transformiše kao polje,

$$U(\vec{a})\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{a}). \quad (5.28)$$

Pošto generatori grupe zadaju infinitezimalne transformacije, razvijamo poslednju jednačinu u red po malim parametrima $a_i = \epsilon_i$. U linearnoj aproksimaciji imamo

$$\begin{aligned} U(\vec{\epsilon})\psi(\vec{r}) &= e^{-i\epsilon_i\tau_i}\psi(\vec{r}) = (1 - i\epsilon_i\tau_i)\psi(\vec{r}), \\ \psi(\vec{r} - \vec{\epsilon}) &= \psi(\vec{r}) + \frac{\partial\psi}{\partial x_i}(-\epsilon_i), \end{aligned} \quad (5.29)$$

pa izjednačavanjem linearnih članova dobijamo

$$-i\epsilon_i\tau_i\psi = -\epsilon_i\frac{\partial\psi}{\partial x_i}. \quad (5.30)$$

Pošto su parametri ϵ_i nezavisni a funkcija ψ proizvoljna, iz poslednje jednačine sledi da su generatori translacija impulsi,

$$\tau_i = -i\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\hat{p}_i}{\hbar}. \quad (5.31)$$

Kod sistema od N čestica, talasna funkcija zavisi od koordinata svih čestica, $\psi = \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$. Pri translaciji za vektor \vec{a} imamo

$$U(\vec{a})\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = e^{-i\epsilon_i\mathcal{T}_i}\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \psi(\vec{r}_1 - \vec{a}, \dots, \vec{r}_N - \vec{a}). \quad (5.32)$$

Postupkom sličnim prethodnom dobija se da je, u tom slučaju, generator translacija ukupni impuls,

$$\hbar\vec{\mathcal{T}} = \vec{P} = \sum_{k=1}^N \vec{p}_k. \quad (5.33)$$

Pošto smo odredili generatore, možemo da nađemo kako translacije deluju na operatore koordinate i impulsa. Slično kao kod parnosti, iz uslova (5.28)

$$\langle \vec{r} | U(\vec{a}) | \psi \rangle = \langle \vec{r} - \vec{a} | \psi \rangle \quad (5.34)$$

sledi da je

$$U(\vec{a})|\vec{r}\rangle = |\vec{r} + \vec{a}\rangle \quad (5.35)$$

Koristeći ovu relaciju ili primenom Baker-Campbell-Hausdorff-ove formule (3.106), lako se dobija

$$U(-\vec{a})\hat{r}U(\vec{a}) = \hat{r} + \vec{a}, \quad (5.36)$$

$$U(-\vec{a})\hat{p}U(\vec{a}) = \hat{p}. \quad (5.37)$$

Logika prethodnog izvođenja može da se preokrene i tada daje drugi pristup kvantovanju koji se ne bazira na kanonskom formalizmu nego na simetrijama, a zove *Weyl-ovo kvantovanje*. Znamo naime da je u klasičnoj mehanici impuls generator translacija. U Weyl-ovom pristupu, impulsom ćemo proglasiti onu veličinu koja u kvantnomehaničkoj reprezentaciji generiše translacije, odnosno koja daje rešenje jednačina (5.36-5.37). Rešavanjem ovog sistema dobijamo da generatori translacija τ_i treba da zadovoljavaju relacije

$$[\tau_i, x_j] = -i\delta_{ij}. \quad (5.38)$$

Prema tome, $\tau_i = p_i/\hbar = -i\partial_i/\hbar$.

Jedna od najvažnijih primena grupe translacija je u fizici čvrstog stanja. Elektroni u kristalu kreću se u efektivnom elektrostatičkom potencijalu koji je periodičan. Periodičnost kristalne rešetke u tri dimenzije opisuje se pomoću tri vektora rešetke \vec{a}_j koji grade *osnovnu ćeliju*. Zbog toga je efektivni potencijal, a time i hamiltonijan elektrona, invarijantan na translacije za proizvoljni vektor \vec{R} oblika

$$\vec{R} = \sum_{j=1}^3 n_j \vec{a}_j, \quad n_j \in \mathbb{Z}. \quad (5.39)$$

Ove translacije čine diskretnu podgrupu grupe svih translacija; njene elemente u kvantnomehaničkoj reprezentaciji označićemo sa $\hat{U}(\vec{R})$.

Za periodične potencijale važi *Bloch-ova teorema* koja kaže: svojstvene funkcije energije elektrona u kristalu $\psi(\vec{r})$ su proizvod ravnog talasa i periodične funkcije $\phi(\vec{r})$,

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \phi(\vec{r}), \quad \phi(\vec{r} + \vec{R}) = \phi(\vec{r}). \quad (5.40)$$

Pošto smo detaljno analizirali osobine translacija, ovu teoremu možemo i da dokažemo. Sa jedne strane, delovanje translacije na (bilo koju) talasnu funkciju dato je sa

$$\hat{U}(\vec{R})\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{R}). \quad (5.41)$$

Sa druge strane, ako je hamiltonijan invarijantan na translacije

$$\hat{U}^{-1}(\vec{R}) \hat{H} \hat{U}(\vec{R}) = \hat{H}, \quad (5.42)$$

znači da komutira sa svim $\hat{U}(\vec{R})$, pa ceo skup operatora $\{\hat{H}, \hat{U}(\vec{R})\}$ može istovremeno da se dijagonalizuje (translacije među sobom komutiraju). Uzmimo jedno od zajedničkih svojstvenih stanja ovog skupa, $\psi(\vec{r})$:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad \hat{U}(\vec{R})\psi(\vec{r}) = u(\vec{R})\psi(\vec{r}). \quad (5.43)$$

Pošto su operatori $\hat{U}(\vec{R})$ unitarni, njihove svojstvene vrednosti $u(\vec{R})$ su brojevi modula jedan; sem toga, važi

$$u(\vec{R}_1)u(\vec{R}_2) = u(\vec{R}_1 + \vec{R}_2). \quad (5.44)$$

Iz poslednje relacije dobijamo

$$u(\vec{R}) = u(\vec{a}_1)^{n_1} u(\vec{a}_2)^{n_2} u(\vec{a}_3)^{n_3} = e^{-2\pi i \xi_i n_i}, \quad (5.45)$$

gde smo označili

$$e^{-2\pi i \xi_i} = u(\vec{a}_i). \quad (5.46)$$

Uvođenjem vektora *inverzne rešetke* \vec{b}_i relacijom $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$, izraz (5.45) može da se prepíše kao

$$u(\vec{R}) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}}, \quad \vec{k} = \xi_i \vec{b}_i. \quad (5.47)$$

Kombinujući formule (5.41) i (5.47) dobijamo

$$\psi(\vec{r} - \vec{R}) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi(\vec{r}) = e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{R}-\vec{r})} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \psi(\vec{r}), \quad (5.48)$$

što znači da je funkcija

$$\phi(\vec{r}) \equiv e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \psi(\vec{r}) = e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{R})} \psi(\vec{r} - \vec{R}) \quad (5.49)$$

periodična.

Konačno, da odredimo reprezentaciju *rotacija*. Rotacija oko z -ose za ugao α na talasnu funkciju $\psi(\vec{r})$ deluje kao

$$U(R(\alpha, \vec{e}_z))\psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}(\alpha, \vec{e}_z)\vec{r}), \quad (5.50)$$

gde je $R(\alpha, \vec{e}_z)$ matrica rotacije izračunata u dodatku. Za infinitezimalno mali ugao $\alpha = \epsilon$ je

$$R(\epsilon, \vec{e}_z) = \begin{pmatrix} 1 & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.51)$$

Linearizacija jednačine (5.50) daje

$$U(R(\epsilon, \vec{e}_z))\psi(x, y, z) = (1 - i\epsilon\tau_z)\psi(x, y, z), \quad (5.52)$$

$$\psi(R^{-1}(\epsilon, \vec{e}_z)\vec{r}) = \psi(x + \epsilon y, -\epsilon x + y, z) = \psi(x, y, z) + \epsilon\left(y\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial y}\right). \quad (5.53)$$

Izjednačavanjem,

$$\tau_z\psi = iy\frac{\partial\psi}{\partial x} - ix\frac{\partial\psi}{\partial y} = \frac{L_z}{\hbar}\psi. \quad (5.54)$$

Ovaj rezultat se lako uopštava. Ako označimo kao ranije $\epsilon_i = \epsilon n_i$, za proizvoljnu infinitezimalnu rotaciju je

$$\psi(R(\epsilon, -\vec{n})\vec{r}) = \psi(x_i - \epsilon_{ijk}\epsilon_j x_k) = \psi(x_i) - \epsilon_{ijk}\epsilon_j x_k \partial_i \psi, \quad (5.55)$$

$$U(R(\alpha, \vec{n})) = e^{-i\alpha_j \tau_j}, \quad U(R(\epsilon, \vec{n}))\psi = (I - i\epsilon_j \tau_j)\psi. \quad (5.56)$$

Upoređivanjem linearnih članova,

$$\hbar\tau_j = i\hbar\epsilon_{ijk}x_k\partial_i = L_j. \quad (5.57)$$

I za rotacije može da se proveriti da se operatori položaja i impulsa u reprezentaciji (5.17) transformišu kao vektori, odnosno da za rotaciju (zadatu matricom R) važi

$$U^{-1}(R)x_i U(R) = R_{ik}x_k, \quad U^{-1}(R)p_i U(R) = R_{ik}p_k. \quad (5.58)$$

Ako razvijemo levu stranu gornjeg izraza, koji definiše *pridruženu reprezentaciju*, za proizvoljnu opservablu M do linearnog reda, dobijamo

$$e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon_j L_j} M e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_j L_j} = M + \frac{i}{\hbar}\epsilon_j [L_j, M]. \quad (5.59)$$

Komutator opservable M sa momentom impulsa određuje njen tenzorski karakter. Skalarne veličine se ne menjaju pri rotacijama pa je zato

$$[L_i, r^2] = 0, \quad [L_i, p^2] = 0, \quad [L_i, L^2] = 0, \quad (5.60)$$

dok za vektore \vec{r} , \vec{p} ili \vec{L} imamo

$$[L_i, x_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}x_k, \quad [L_i, p_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}p_k, \quad [L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k. \quad (5.61)$$

5.3 Algebra ugaonog momenta

Rešićemo ponovo svojstveni problem operatora momenta impulsa, sada čisto algebarski. Rotacije u trodimenzionom euklidskom prostoru opisane su 3×3 matricama R koje su realne, simetrične i imaju determinantu 1. One čine grupu specijalnih ortogonalnih transformacija u tri dimenzije, $SO(3)$; odgovarajuća algebra njenih generatora označava se sa $so(3)$. U teoriji Liejevih grupa elementi koji komutiraju sa svim generatorima (pa i elementima) grupe nazivaju se *Casimir-ovi operatori*: grupa rotacija ima, kao što smo videli, jedan Casimir-ov operator, $L^2 = L_i L_i$.

Treba da rešimo zajednički svojstveni problem od L^2 i L_z . Već smo definisali operatore podizanja i spuštanja

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y, \quad L_- = (L_+)^{\dagger}, \quad (5.62)$$

i pokazali da važi

$$[L^2, L_{\pm}] = 0, \quad [L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}, \quad [L_+, L_-] = 2\hbar L_z \quad (5.63)$$

$$\tilde{L}^2 = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z = L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z. \quad (5.64)$$

Označimo kao ranije svojstvene vrednosti od L_z i L^2 sa $b\hbar$ i $a\hbar^2$ i pretpostavimo da postoji jedan zajednički svojstveni vektor $|a, b\rangle$ koji odgovara ovim vrednostima,

$$L^2 |a, b\rangle = a\hbar^2 |a, b\rangle, \quad L_z |a, b\rangle = b\hbar |a, b\rangle, \quad (5.65)$$

koji je normiran, $\langle a, b | a, b \rangle = 1$. Naravno, L^2 je pozitivan operator pa je $a \geq 0$. Da operator podizanja L_+ povećava vrednost b za 1 a ne menja a pokazaćemo na sledeći način. Ako označimo

$$|\chi\rangle = L_+ |a, b\rangle, \quad (5.66)$$

imamo

$$\begin{aligned} L^2 |\chi\rangle &= L^2 L_+ |a, b\rangle = L_+ L^2 |a, b\rangle = a\hbar^2 |\chi\rangle, \\ L_z |\chi\rangle &= L_z L_+ |a, b\rangle = (L_+ L_z + \hbar L_z) |a, b\rangle = (b+1)\hbar |\chi\rangle. \end{aligned} \quad (5.67)$$

To znači da je i vektor $|\chi\rangle$ zajednički svojstveni vektor za L^2 i L_z , $|\chi\rangle \sim |a, b+1\rangle$. Izračunajmo njegovu normu:

$$\langle \chi | \chi \rangle = \langle a, b | L_- L_+ |a, b\rangle = \langle a, b | L^2 - L_z^2 - \hbar L_z |a, b\rangle = (a - b^2 - b)\hbar^2. \quad (5.68)$$

Dakle, možemo da pišemo

$$L_+ |a, b\rangle = \hbar \sqrt{a - b(b+1)} |a, b+1\rangle, \quad (5.69)$$

pri čemu smo u poslednjoj formuli fiksirali i fazni faktor. Da bi kvadrat norme bio pozitivan mora da važi

$$a \geq b(b+1). \quad (5.70)$$

Slično, za $|\varphi\rangle = L_- |a, b\rangle$ dobija se

$$L_- |a, b\rangle = \hbar \sqrt{a - b(b-1)} |a, b-1\rangle \quad (5.71)$$

i uslov

$$a \geq b(b-1). \quad (5.72)$$

Uslovi (5.70-5.72) znače da je za fiksiranu vrednost a , apsolutna vrednost b ograničena odozgo, $a \geq b^2$. Sa druge strane, pri svakom delovanju L_+ na svojstveni vektore vrednost b se povećava za

1, tako da se uzastopnim delovanjem b može proizvoljno povećati. Ovo je kontradikcija, osim ako postoji b_{max} za koje je

$$L_+ |a, b_{max}\rangle = 0 \quad (5.73)$$

pa se daljom primenom L_+ stalno dobija nula. Iz (5.69) vidi se da za b_{max} važi

$$a = b_{max}(b_{max} + 1). \quad (5.74)$$

Sličnim rezonovanjem može da se zaključi da i delovanje L_- mora da se prekine na određenoj vrednosti, b_{min} ; iz (5.71) se dobija

$$a = b_{min}(b_{min} - 1). \quad (5.75)$$

Uslov

$$b_{max}(b_{max} + 1) = b_{min}(b_{min} - 1), \quad \text{tj.} \quad (b_{max} + b_{min})(b_{max} - b_{min} + 1) = 0 \quad (5.76)$$

daje

$$b_{max} = -b_{min} \equiv l. \quad (5.77)$$

Dalje, pošto je broj koraka između najnižeg stanja $|a, b_{min}\rangle$ i najvišeg stanja $|a, b_{max}\rangle$ za fiksiranu a jednak $b_{max} - b_{min} = 2l$, sledi da je $2l$ prirodan broj ili nula. Znači, l je ceo ili poluceo broj. Pošto je $-l \leq b \leq l$, imamo $2l + 1$ različitih vrednosti kvantnog broja $b \equiv m$. Skup svojstvenih stanja $\{|l, m\rangle\}$ koja imaju fiksiranu vrednost l zove se *multiplet*.

Da sumiramo: svojstvene vrednosti momenta impulsa su diskretne, definisane brojevima l i m koji su poluceli ili celi. Dobijeni bazis svojstvenih stanja momenta impulsa $\{|l, m\rangle\}$ se naziva *standardni bazis*, a izbor generatora L_z, L_{\pm} daje *standardnu formu* algebre $so(3)$. Na svakom multipletu realizovana jedna reprezentacija grupe $SO(3)$, u kojoj su operatori momenta impulsa L_i kvadratne $(2l + 1) \times (2l + 1)$ matrice. Ova reprezentacija je *ireducibilna* jer se svi vektori $|l, m\rangle$ dobiti iz proizvoljnog početnog vektora, npr. iz $|l, -l\rangle$ delovanjem operatorom L_+ . Ponovimo još jednom osnovne relacije:

$$L^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l + 1) |l, m\rangle \quad (5.78)$$

$$L_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle \quad (5.79)$$

$$L_+ |l, m\rangle = \hbar \sqrt{(l - m)(l + m + 1)} |l, m + 1\rangle \quad (5.80)$$

$$L_- |l, m\rangle = \hbar \sqrt{(l - m + 1)(l + m)} |l, m - 1\rangle. \quad (5.81)$$

Svaka od ireducibilnih reprezentacija jednoznačno je okarakterisana vrednošću Casimir-ovog operatora L^2 grupe $SO(3)$ ⁵. Videli smo ranije da je prostor koji obrazuju sferni harmonici Y_l^m beskonačnodimenzion: ta reprezentacija grupe $SO(3)$ je reducibilna i predstavlja direktni zbir svih ireducibilnih reprezentacija sa celobrojnim vrednostima l .

5.4 Spin 1/2

Rešavanjem jednačine za orbitni ugaoni moment dobili smo da su vrednosti kvantnih brojeva l i m celobrojne. Sa druge strane, iz opšte teorije ugaonog momenta odnosno iz algebarske analize sledi da vrednosti l i m u principu mogu da budu i polucele. Da li su stvarno stanja sa polucelim l matematički dozvoljena, ali u prirodi nisu realizovana? Ovakva stanja otkrili su 1922. Stern i Gerlach u eksperimentu koji ćemo opisati.

⁵Ova osobina važi za kompaktne grupe: kod nekompaktnih grupa mogu da postoje neekvivalentne ireducibilne reprezentacije koje imaju iste vrednosti svih Casimir-ovih operatora.

Razmotrimo skretanje snopa elektrona koji se u početku kreće duž x -ose, pri prolasku kroz nehomogeno magnetno polje $\vec{B} = B(\vec{r}) \vec{e}_z$. Dominantni član koji opisuje interakciju elektrona sa slabim magnetnim poljem je, i u slučaju nehomogenog polja, dipolni član $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, pa je hamiltonijan elektrona

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \mu_B L_z B(\vec{r}). \quad (5.82)$$

Promena z -komponente impulsa p_z može da se odredi iz jednačina kretanja u Heisenberg-ovoj slici ili iz Ehrenfest-ove teoreme:

$$i\hbar \frac{d\langle p_z \rangle}{dt} = \langle [p_z, H] \rangle = \mu_B \langle L_z [p_z, B] \rangle = -i\hbar \mu_B \langle L_z \frac{\partial B}{\partial z} \rangle. \quad (5.83)$$

U slučaju kada je gradijent $\partial B / \partial z = \text{const}$, dobijamo

$$\frac{d\langle p_z \rangle}{dt} = -\mu_B \frac{\partial B}{\partial z} \langle L_z \rangle. \quad (5.84)$$

Znači, ako je snop pre ulaska u magnetno polje bio u stanju sa određenom vrednošću L_z , pri prolasku kroz magnetno polje on skreće u pravcu nehomogenosti polja, proporcionalno $\langle L_z \rangle$. Ako je ulazni snop mešano stanje sa različitim vrednostima magnetnog kvantnog broja, pri prolasku kroz magnetno polje on će se razdvojiti na onoliko (pod)snopova koliko je inicijalno bilo pomešanih svojstvenih vrednosti L_z .

Ekperimentalnu situaciju analognu gore opisanoj ostvarili su Stern i Gerlach. Oni su merili vrednosti momenta impulsa (tj. magnetnog dipolnog momenta) atoma srebra pri prolasku kroz nehomogeno magnetno polje. Srebro ima omotač koji se sastoji od 47 elektrona, pri čemu je ukupni ugaoni moment prvih 46 elektrona nula tako da je moment impulsa atoma jednak momentu impulsa poslednjeg (5s) elektrona. U principu i nezavisno od detalja strukture elektronskog omotača, očekivali bismo da se inicijalni snop razdvaja na neparan broj snopova, $2l + 1$. Međutim, u eksperimentu snop se razdvaja na dva dela! Sličan eksperiment sa atomima vodonika u osnovnom stanju ponovili su 1927. Phipps i Taylor, sa istim rezultatom: umesto da ne skrećući prolazi kroz magnetno polje (pošto je u stanju sa $l = 0$), snop se cepa na dva. Pri tome je utvrđeno da odgovarajući magnetni moment, zbog svog reda veličine, potiče baš od elektrona. Jedino objašnjenje ovakvog ponašanja je da elektron osim orbitnog ima i *unutrašnji moment impulsa, spin*: vrednosti ovog unutrašnjeg momenta impulsa su polucele. Vrednost $s = 1/2$ dobija se iz činjenice da se početni snop deli na dva: $2s + 1 = 2$. U skladu s tim, magnetni kvantni broj spina može biti $m_s = \pm 1/2$.

Danas znamo da sve elementarne čestice imaju unutrašnji moment impulsa i da je on jedna od njihovih osnovnih karakteristika, kao što je masa. Osim spina elementarne čestice imaju i druge tzv. *unutrašnje stepene slobode*. Čestice sa polucelom spinom (elektron, proton, neutron) zovu se *fermioni*, dok se čestice sa celobrojnim spinom zovu *bozoni* (foton, Higgs-ov bozon). Kao što se u Stern-Gerlach-ovom eksperimentu vidi, spin kao i orbitni ugaoni moment interaguje sa magnetnim poljem i ima svoj magnetni dipolni moment

$$\vec{\mu} = g \frac{-|e|\hbar}{2mc} \vec{s} = -g\mu_B \vec{s}. \quad (5.85)$$

Faktor proporcionalnosti g zove se *žiromagnetni odnos* i za elektron on iznosi $g = 2.0022$. Formule analogne (5.85) važe i za proton i neutron (uz zamenu $m \rightarrow m_p, m_n$ odnosno $\mu_B \rightarrow \mu_N = e_p / (2m_p c)$), a žiromagnetni odnosi protona i neutrona nisu celobrojni nego razlomljeni, $g_p = 5.58$ i $g_n = -3.82$.

Analizirajmo detaljnije spinska stanja elektrona. Kao što smo videli, projekcija spina s_z ima dve moguće vrednosti, $m_s = \pm 1/2$; vrednost kvadrata spina s^2 je $3\hbar^2/4$. Znači, prostor stanja

spina je dvodimenzion a spinska stanja možemo prikazati kao vektore-kolone od dva elementa. Svojstvena stanja operatora s_z pišemo kao

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.86)$$

Da odredimo i matrice kojima se u ovom prostoru reprezentuju komponente spina. Očigledno,

$$s_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad s^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.87)$$

s_{\pm} možemo naći iz njihovog delovanja na vektore bazisa. Iz formule (5.80),

$$s_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \quad s_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.88)$$

pa dobijamo

$$s_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_- = (s_+)^{\dagger} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.89)$$

$$s_x = \frac{1}{2}(s_+ + s_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{1}{2i}(s_+ - s_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.90)$$

Matrice σ_i

$$s_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i \quad (5.91)$$

nazivaju se *Pauli-jeve matrice*, a osnovna relacija koja ih karakteriše je

$$\sigma_i \sigma_k = \delta_{ik} + i\epsilon_{ikl} \sigma_l. \quad (5.92)$$

Projekcija spina na osu $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z) = (\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta)$ data je sa $\sigma_{\vec{n}} = \vec{n} \cdot \vec{\sigma}$,

$$s_{\vec{n}} = \frac{\hbar}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma}, \quad \sigma_{\vec{n}} = \begin{pmatrix} n_z & n_- \\ n_+ & -n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}. \quad (5.93)$$

Kako u svom udžbeniku kaže Sakurai⁶, spin 1/2 i generalno, sistemi sa dva stepena slobode su "maksimalno kvantni sistemi" i često se uzimaju za ilustraciju tipično kvantnih efekata. U nastavku ćemo analizirati problem analogan Larmor-ovoj precesiji: precesiju spina u homogenom magnetnom polju. Zanima nas kako evoluiria sistem koji ima spin 1/2 u magnetnom polju $\vec{B} = B\vec{e}_z$, $B = \text{const}$. Videli smo da je hamiltonijan koji opisuje njegovo kretanje

$$H = 2\mu_B \vec{s} \cdot \vec{B} = \omega s_z, \quad \omega = \frac{|e|B}{mc}. \quad (5.94)$$

Odavde lako zaključujemo da su svojstvena stanja hamiltonijana zapravo svojstvena stanja z -projekcije spina, a svojstvene energije jednake su $\pm\hbar\omega/2$. Proanalizirajmo vremensku evoluciju ovog sistema. Evolucioni operator

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = e^{-\frac{i\omega s_z t}{\hbar}} \quad (5.95)$$

proporcionalan je operatoru rotacije oko z -ose za ugao $\alpha = \omega t$. $U(t)$ se, korišćenjem osobine $\sigma_z^2 = I$, može izračunati eksplicitno,

$$e^{-\frac{i\alpha s_z}{\hbar}} = e^{-\frac{i\alpha \sigma_z}{2}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \left(\frac{-i\alpha \sigma_z}{2}\right)^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{-i\alpha \sigma_z}{2}\right)^{2n+1}. \quad (5.96)$$

⁶J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 1994.

Pošto je

$$\sigma_z^{2n} = I, \quad \sigma_z^{2n+1} = \sigma_z, \quad (5.97)$$

dobijamo

$$e^{-\frac{i\alpha s_z}{\hbar}} = \cos \frac{\alpha}{2} I - i \sin \frac{\alpha}{2} \sigma_z = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\alpha}{2}} \end{pmatrix}, \quad (5.98)$$

doduše ovo se vidi i direktno iz (5.87). Dobijena formula daje važnu karakteristiku spinske reprezentacije grupe $SO(3)$: rotacija za ugao 2π nije jedinična transformacija nego

$$U\left(\frac{2\pi}{\omega}\right) = -I. \quad (5.99)$$

Drugim rečima, period promene stanja spina elektrona u magnetnom polju je $T = 4\pi/\omega$. Sa druge strane, ako izračunamo kako evoluiraju operatori spina, na primer $s_x(t)$, dobijamo

$$s_x(t) = U^{-1}(t) s_x U(t) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} = \cos \omega t s_x - \sin \omega t s_y. \quad (5.100)$$

Prema tome, period precesije *opservable spina* je dvostruko manji, $T' = 2\pi/\omega$. Na nivou očekivanih vrednosti ovu razliku je lakše razumeti: za vreme $2\pi/\omega$ stanja se promene za faktor -1 , $|\chi\rangle \rightarrow -|\chi\rangle$, dok očekivane vrednosti $\langle \chi | \vec{s} | \chi \rangle$ ostaju iste jer je $(-1)^2 = 1$.

Precesija spina u magnetnom polju daje mogućnost eksperimentalne provere činjenice da se, kod fermiona, tek rotacija za ugao 4π svodi na jediničnu transformaciju. U eksperimentima koje su 1975. izveli nezavisno H. Rauch i S. A. Werner, ulazni snop neutrona podeli se na dva snopa od kojih jedan prolazi kroz magnetno polje a drugi ne. Snopovi se posle opet spajaju i detektuje se njihova interferencija. Iz naše prethodne analize je jasno da će fazna razlika zavistiti od jačine polja B i vremena koje prvi snop provede u magnetnom polju. Variranjem parametara i analizom interferencione slike dobija se da je period promene talasne funkcije zaista gore uvedeno T , ili rečima teorije grupa, da je reprezentacija $s = 1/2$ dvoznačna.

5.5 Prostor stanja elektrona

Stern-Gerlach-ov i ostali eksperimenti pokazuju da elektron, osim položaja, impulsa, energije, orbitnog momenta itd. karakteriše dodatna osobina nezavisna od prostornih promenljivih: spin. Naravno, spin se manifestuje kroz interakciju sa magnetnim poljem i tako utiče na kretanje elektrona. Kinematička nezavisnost spina od prostornih osobina znači da u talasnu funkciju elektrona treba da dodamo informaciju o spinu odnosno kvantne brojeve koji ga opisuju,

$$\Psi(s, \vec{r}) = \langle s, \vec{r} | \Psi \rangle, \quad (5.101)$$

kao i da se merenje spina može izvršiti istovremeno sa merenjem prostornih opservabli. Matematički, nezavisnost se iskazuje kroz činjenicu da je prostor stanja elektrona tenzorski proizvod orbitnog i spinskog prostora,

$$|s, \vec{r}\rangle = |s\rangle \otimes |\vec{r}\rangle. \quad (5.102)$$

Đodavanještepenei slobode se u kvantnoj mehanici uvek realizuje tenzorskim proizvodom, što smo već koristili pri prelasku sa opisa čestice koja se kreće u jednoj na česticu u tri dimenzije, jer je analogno sa (5.102) imamo

$$|\vec{r}\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle. \quad (5.103)$$

Osnovna razlika je što je u slučaju spina, *spinski prostor* prostor brojnih kolona od dva elementa, dok je prostor stanja jednodimenzione čestice \mathcal{H} obrazovan bazisom svojstvenih vektora koordinate $|x\rangle$ pa je beskonačnodimenzion. Za elektron tzv. *nekorelisani bazis* je dat sa

$$\Psi(+, \vec{r}) = |+\rangle \otimes \psi_+(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi(-, \vec{r}) = |-\rangle \otimes \psi_-(\vec{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix},$$

a proizvoljno stanje koje nema oštru vrednost spina s_z je

$$\Psi(s, \vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}, \quad (5.104)$$

i ova dvokomponentna talasna funkcija naziva se *spinor*. Naravno, prostor stanja elektrona je dvostruko veći od prostora stanja čestice bez spina pa je u kompletnom opisu na primer, degeneracija n -tog nivoa energije vodonikovog atoma zapravo $2n^2$, jer svako od n^2 orbitnih stanja $|n, l, m\rangle$ može imati dve projekcije spina na z -osu, $\pm 1/2$. Zato je prava oznaka svojstvenih funkcija elektrona u atomu vodonika $|n, l, m, m_s\rangle$. U mnogim fizičkim problemima spinski stepen slobode se dekupluje tj. razdvaja od prostornih stepeni slobode, pa uticaj spina možemo da zanemarimo, odnosno preciznije, da evoluciju spina posmatramo nezavisno od evolucije prostornih stepeni slobode.

Razume se, struktura tenzorskog proizvoda prostora stanja je usklađena sa pretpostavkom o nezavisnosti stepena slobode i kada se reprezentuju opservable. Činjenica da operatori koji pripadaju različitim faktor-prostorima komutiraju upravo znači da se odgovarajuće opservable mogu istovremeno meriti tj. da su nezavisne. Da bismo formalizam razradili detaljnije, rešićemo u nastavku problem kretanja neutrona u homogenom magnetnom polju i naći njegove svojstvene energije. Na ovom primeru videćemo da je konkretna primena tenzorskog proizvoda toliko prirodna da je često eksplicitna notacija suvišna.

Mada je električno neutralan, neutron ima magnetni moment jer ima spin, $\mu = -g\mu_N\vec{s}$, i prema tome interaguje sa magnetnim poljem. Odgovarajući hamiltonijan je

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \vec{\mu} \cdot \vec{B}, \quad (5.105)$$

ili ako uzmemo u obzir da je impuls definisan u orbitnom prostoru a spin u spinskom, hamiltonijan preciznije možemo zapisati kao

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} \right) + \frac{g\mu_N \hbar B}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes I. \quad (5.106)$$

z -osu smo, očigledno, stavili duž pravca magnetnog polja. Matrice u tenzorskom proizvodu se množe tako što svaki element prve matrice množi celu drugu matricu:

$$H = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{g\mu_N \hbar B}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{g\mu_N \hbar B}{2} \end{pmatrix}. \quad (5.107)$$

Stacionarna Schrödinger-ova jednačina za gornji hamiltonijan glasi

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{g\mu_N \hbar B}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{g\mu_N \hbar B}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}, \quad (5.108)$$

odnosno

$$\begin{aligned}\Delta\psi_+ + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{g\mu_N\hbar B}{2} \right) \psi_+ &= 0, \\ \Delta\psi_- + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{g\mu_N\hbar B}{2} \right) \psi_- &= 0.\end{aligned}\quad (5.109)$$

Ravni talasi ψ_{\pm} imaju različit impuls. Ukupno rešenje $\Psi(s, \vec{r})$ energije E je spinor

$$\Psi(s, \vec{r}) = \begin{pmatrix} ae^{i\vec{k}_+ \cdot \vec{r}} \\ be^{i\vec{k}_- \cdot \vec{r}} \end{pmatrix}, \quad k_{\pm}^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \mp \frac{g\mu_N\hbar B}{2}, \quad (5.110)$$

gde je

$$\frac{a^* a}{|k_+|} + \frac{b^* b}{|k_-|} = \frac{\hbar^2}{m(2\pi)^3}, \quad (5.111)$$

ako rešenja normiramo na δ -funkciju po energiji.

5.6 Sabiranje ugaonih momenata

Videli smo da je u slučaju više čestica ukupni impuls sistema

$$\vec{P} = \sum_{k=1}^N \vec{p}_k, \quad (5.112)$$

opservabla koja generiše translacije. Isto je i sa momentom impulsa. Razmotrimo na primer kako se pri rotacijama menja talasna funkcija elektrona odnosno spinor

$$|\Psi\rangle = |\chi\rangle \otimes |\psi\rangle, \quad \Psi(s, \vec{r}) = \chi(s) \otimes \psi(\vec{r}). \quad (5.113)$$

Stanje (5.113) je nekorelisano jer predstavlja proizvod spinskog i prostornog stanja. Ako izvršimo rotaciju za ugao α oko ose \vec{n} , imamo

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha n_i s_i} |\chi\rangle \otimes e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha n_i L_i} |\psi\rangle, \quad (5.114)$$

odnosno u talasnoj reprezentaciji,

$$\Psi(s, \vec{r}) \rightarrow \Psi'(s, \vec{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha s \vec{n}} \chi \psi(R^{-1}(\alpha, \vec{n}) \vec{r}). \quad (5.115)$$

Identično se transformiše i proizvoljni spinor. Posmatrajući infinitezimalnu rotaciju dobijamo da je generisana operatorom

$$\vec{J} = \vec{S} + \vec{L} \quad (5.116)$$

ili preciznije, poštujući notaciju tenzorskog proizvoda,

$$\vec{J} = \vec{S} \otimes I + I \otimes \vec{L}. \quad (5.117)$$

Ako imamo N čestica, $k = 1, 2, \dots, N$, ukupni moment impulsa je

$$\vec{J} = \sum_{k=1}^N \vec{J}_k. \quad (5.118)$$

Razmotrimo detaljnije primer sabiranja spinskog i orbitnog ugaonog momenta čestice spina $1/2$. Jedan od bazisa koji se mogu koristiti za opis ukupnog ugaonog momenta elektrona je nekorelisani bazis, koji ima dobro definisane vrednosti s i spina i orbitnog ugaonog momenta. Ovo je moguće jer, razume se,

$$[s_i, L_j] = 0, \quad (5.119)$$

pa ova stanja možemo da označimo kao $|s, m_s, l, m\rangle$, odnosno

$$\langle \theta, \varphi | \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, l, m \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes Y_l^m = \begin{pmatrix} Y_l^m \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\langle \theta, \varphi | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, l, m \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes Y_l^m = \begin{pmatrix} 0 \\ Y_l^m \end{pmatrix}.$$

Međutim, nas u principu zanimaju svojstvene vrednosti ukupnog momenta impulsa, odnosno zajedničke svojstvene vrednosti opservabli j^2 i j_z . Pošto je

$$j^2 = (\vec{s} + \vec{L})^2 = s^2 + L^2 + 2(s_x L_x + s_y L_y + s_z L_z), \quad (5.120)$$

lako se vidi da važi

$$[j^2, L^2] = 0, \quad [j^2, s^2] = 0, \quad (5.121)$$

kao i

$$[j_z, L^2] = 0, \quad [j_z, s^2] = 0 \quad (5.122)$$

jer su s^2 i L^2 skalari pa komutiraju sa ukupnim momentom impulsa \vec{j} . Zato kao osnovni skup stanja možemo da izaberemo $|j, m_j, s, l\rangle$, koje ćemo označavati i sa $\Psi_{jm_j l}$. Da bismo odredili ova stanja, prvo da vidimo eksplicitno kako operatori j_z i j^2 izgledaju. Imamo

$$j_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes L_z + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes I = \begin{pmatrix} L_z + \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & L_z - \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix},$$

$$j^2 = s^2 + L^2 + 2\vec{s} \cdot \vec{L} = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes I + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes L^2$$

$$+ \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes L_x + \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \otimes L_y + \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes L_z$$

$$= \begin{pmatrix} L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar L_z & \hbar L_- \\ \hbar L_+ & L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar L_z \end{pmatrix}. \quad (5.123)$$

Želimo da rešimo zajednički svojstveni problem od j^2 i j_z , tj. jednačine

$$j^2 \Psi_{jm_j l} = \hbar^2 j(j+1) \Psi_{jm_j l}, \quad j_z \Psi_{jm_j l} = \hbar m_j \Psi_{jm_j l}. \quad (5.124)$$

Pretpostavimo da je rešenje oblika

$$\Psi_{jm_j l} = \begin{pmatrix} \alpha Y_l^m \\ \beta Y_l^{m'} \end{pmatrix}. \quad (5.125)$$

Svojstvena jednačina za j_z daje

$$m_j = m + \frac{1}{2} = m' - \frac{1}{2}, \quad (5.126)$$

odnosno $m = m_j - \frac{1}{2}$, $m' = m_j + \frac{1}{2}$, $m' = m + 1$:

$$\Psi_{jm_j l} = \begin{pmatrix} \alpha Y_l^{m_j - \frac{1}{2}} \\ \beta Y_l^{m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \quad (5.127)$$

Ako se ovaj izraz uvrsti u svojstvenu jednačinu za j^2 , dobijamo

$$\begin{pmatrix} l(l+1) + \frac{3}{4} + m & \sqrt{l(l+1) - (m+1)m} \\ \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} & l(l+1) + \frac{3}{4} - (m+1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha Y_l^m \\ \beta Y_l^{m+1} \end{pmatrix} = j(j+1) \begin{pmatrix} \alpha Y_l^m \\ \beta Y_l^{m+1} \end{pmatrix}.$$

Rešavanjem poslednje jednačine dobijaju se vrednosti konstanti α i β tj. njihov odnos, kao i vrednosti kvantnog broja j . Ako označimo $a = j(j+1)$, uslov da je determinanta sistema nula je

$$\begin{vmatrix} l(l+1) + \frac{3}{4} + m - a & \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \\ \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} & l(l+1) + \frac{3}{4} - (m+1) - a \end{vmatrix} = 0. \quad (5.128)$$

Vrednost ove determinante ne zavisi od m : prethodna jednačina daje

$$a^2 - 2a \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + \left(l + \frac{1}{2} \right)^4 - \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 = 0, \quad (5.129)$$

odnosno

$$a_{1,2} = \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 \pm \left(l + \frac{1}{2} \right) = \begin{cases} l^2 - \frac{1}{4} \\ l^2 + 2l + \frac{3}{4} \end{cases}. \quad (5.130)$$

Dobili smo dve moguće svojstvene vrednosti za j : $j = l + 1/2$ i $j = l - 1/2$. Vrednosti koeficijenta α i β nalaze se iz svojstvene jednačine. Na primer, za $j = l - 1/2$ imamo

$$(l+m+1)\alpha = -\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\beta, \quad \alpha = -\sqrt{\frac{j-m_j+1}{j+m_j+1}}\beta. \quad (5.131)$$

Najjednostavniji slučaj slaganja ugaonih momenata je sabiranje dva spina $s = 1/2$,

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2, \quad (5.132)$$

\vec{S} je ukupni spin sistema. Kao što smo rekli, spinovi različitih čestica međusobno komutiraju a komponente ukupnog spina zadovoljavaju

$$[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k. \quad (5.133)$$

Kao i malopre imamo

$$\vec{S}^2 = \vec{s}_1^2 + \vec{s}_2^2 + 2\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2, \quad (5.134)$$

gde je

$$\vec{s}_1 = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \otimes I, \quad \vec{s}_2 = \frac{\hbar}{2} I \otimes \vec{\sigma}. \quad (5.135)$$

Tenzorskim množenjem dobijamo eksplicitne izraze za komponente spina i njihove proizvode: to su matrice 4×4 ,

$$\begin{aligned} S_z &= \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ S_{1z}S_{2z} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \vec{S}^2 &= \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.136)$$

i tako dalje. Bazis u kome su ove matrice napisane je takođe tenzorski proizvod,

$$\begin{aligned} |++\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & |+-\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ |-+\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & |--\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Na osnovu izraza (5.136) vidimo da je S_z u datom bazisu već dijagonalna matrica sa svojstvenim vrednostima $\hbar, 0, -\hbar$; S^2 međutim nije. Doduše, svojstveni vektori su joj $|++\rangle$ i $|--\rangle$, pa svojstveni problem možemo da rešavamo samo za podmatricu $\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ u potprostoru koji je obrazovan vektorima $|+-\rangle$ i $|-+\rangle$. Svojstvene vrednosti ove matrice su $2\hbar^2$ i 0 , a odgovarajući svojstveni vektori su

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (5.137)$$

Da zaključimo: sistem od dva elektrona ima četiri spinska stanja:

$$\begin{aligned} \text{triplet, } S=1: & \quad |++\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle), \quad |--\rangle, \\ \text{singlet, } S=0: & \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle). \end{aligned} \quad (5.138)$$

I konačno da kažemo nešto o slaganju ugaonih momenata u opštem slučaju. Pretpostavimo da imamo dva ugaona momenta \vec{L}_1 i \vec{L}_2 , odnosno dve ireducibilne reprezentacije grupe rotacija karakterisane kvantnim brojevima l_1 i l_2 . Podsistemi su nezavisni,

$$[L_{1i}, L_{2j}] = 0. \quad (5.139)$$

Zbir ova dva momenta je ukupni ugaoni moment sistema,

$$\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2, \quad J^2 = L_1^2 + L_2^2 + 2\vec{L}_1 \cdot \vec{L}_2, \quad (5.140)$$

a prostor stanja je tenzorski proizvod u kome je jedan bazis nekorelisani,

$$|l_1, m_1, l_2, m_2\rangle = |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle. \quad (5.141)$$

Sa druge strane, bazis možemo birati drugačije: istovremenom dijagonalizacijom J^2, J_z, L_1^2 i L_2^2 . Videli smo već na primerima da u ovom slučaju vrednost ukupnog ugaonog momenta j nije jednoznačno određena nego može da ima više vrednosti. Opšte pravilo, odnosno rezultat je: j ima sve vrednosti iz intervala

$$j = |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 1, \dots, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 \quad (5.142)$$

tačno po jedan put. Matematički, reč je o tome kako se tenzorski proizvod dve ireducibilne reprezentacije grupe $SO(3)$ razlaže na direktni zbir njenih ireducibilnih reprezentacija. Koeficijenti u razvoju jednog bazisa po drugom

$$|j, m_j, l_1, l_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{m_1 m_2, j m_j} |l_1, m_1, l_2, m_2\rangle \quad (5.143)$$

zovu se *Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti*:

$$C_{m_1 m_2, j m_j} = \langle l_1, m_1, l_2, m_2 | j, m_j, l_1, l_2 \rangle. \quad (5.144)$$

Skiciraćemo kako se dokazuje iskaz (5.142) i određuju Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti. Polazimo od stanja (5.141) koja su proizvod stanja sa definisanim ugaonim momentom pod sistema 1 i 2. Iz činjenice da je

$$J_z = L_{1z} + L_{2z}, \quad [L_{1z}, L_{2z}] = 0, \quad (5.145)$$

zaključujemo da ta stanja imaju i oštru vrednost ukupnog momenta J_z ,

$$J_z |l_1, m_1, l_2, m_2\rangle = \hbar(m_1 + m_2) |l_1, m_1, l_2, m_2\rangle. \quad (5.146)$$

To znači da je J_z dijagonalno u bazu (5.141), a vrednosti Clebsch-Gordan-ovih koeficijenata

$$\langle l_1, m_1, l_2, m_2 | j, m_j, l_1, l_2 \rangle \sim \delta_{m_j, m_1 + m_2} \quad (5.147)$$

proporcionalne su Kronecker-ovoj delti.

Operator čija svojstvena stanja nisu (5.141) je J^2 . Njegova svojstvena stanja dobićemo kao i ranije, delovanjem operatorima podizanja ili spuštanja na pogodno izabrani vektor. Za ukupni moment impulsa, J_{\pm} su

$$J_+ = J_x + iJ_y = L_{1+} \otimes I + I \otimes L_{2+}, \quad (5.148)$$

$J_- = (J_+)^{\dagger}$. Bazis (5.141) ima $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$ vektora, jer $m_1 = -l_1, \dots, l_1$, $m_2 = -l_2, \dots, l_2$. Prema tome, moguće vrednosti magnetnog kvantnog broja m_j su

$$m_j = m_1 + m_2 = -l_1 - l_2, -l_1 - l_2 + 1, \dots, l_1 + l_2, \quad (5.149)$$

a svi vektori koji imaju fiksiranu vrednost m_j obrazuju potprostor.

Lako se vidi da su potprostori koji odgovaraju minimalnoj i maksimalnoj vrednosti od J_z , $m_j = -l_1 - l_2$ i $m_j = l_1 + l_2$ jednodimenzioni, jer postoji samo po jedan vektor ($|l_1, -l_1, l_2, -l_2\rangle$ i $|l_1, l_1, l_2, l_2\rangle$), respektivno) koji im pripada. Takođe, jasno je da je odgovarajući kvantni broj J^2 za ova dva vektora, $j = l_1 + l_2$. Prema tome, imamo

$$\begin{aligned} |l_1, -l_1, l_2, -l_2\rangle &= |j = l_1 + l_2, m_j = -l_1 - l_2, l_1, l_2\rangle, \\ |l_1, l_1, l_2, l_2\rangle &= |j = l_1 + l_2, m_j = l_1 + l_2, l_1, l_2\rangle. \end{aligned} \quad (5.150)$$

Od $|l_1, l_1, l_2, l_2\rangle$ do $|l_1, -l_1, l_2, -l_2\rangle$ dolazi se uzastopnim delovanjem operatora J_- : pošto J_- i J^2 komutiraju, ovaj postupak neće promeniti vrednost $j = l_1 + l_2$, i daje tačno jedan ceo multiplet ugaonog momenta. Dimenzija tog multipleta je $2(l_1 + l_2) + 1$.

Razmotrimo sledeći svojstveni potprostor operatora J_z , onaj za $m_j = l_1 + l_2 - 1$. Njega obrazuju dva linearno nezavisna vektora: $|l_1, l_1 - 1, l_2, l_2\rangle$ i $|l_1, l_1, l_2, l_2 - 1\rangle$. Ako u ovom dvodimenzionom potprostoru za jedan od bazisnih vektora uzmemo vektor iz $j = l_1 + l_2$ multipleta, tj. onaj koji se dobija kao

$$|j = l_1 + l_2, m_j = l_1 + l_2 - 1, l_1, l_2\rangle \sim J_- |j = l_1 + l_2, m_j = l_1 + l_2, l_1, l_2\rangle, \quad (5.151)$$

drugi, njemu ortogonalni vektor (mora da) odgovara vrednosti $j = l_1 + l_2 - 1$ jer mu je $m_j = l_1 + l_2 - 1$. On predstavlja gornji vektor sledećeg multipleta, onaj sa maksimalnom vrednošću J_z . I ovaj multiplet se sadrži ceo, a ostale njegove vektore, svih $2(l_1 + l_2 - 1) + 1$, dobijamo iz gornjeg delovanjem operatora J_- . Postupak možemo da produžimo dalje: njegovo bitno svojstvo je da uvek daje cele multiplete momenta impulsa J^2 , a svaki sledeći multiplet ima kvantni broj j za

jedan manji od prethodnog. Broj koraka k koji možemo da napravimo dok ne iscrpimo ceo $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$ -dimenzioni prostor može da se odredi iz jednačine

$$2(l_1 + l_2) + 1 + 2(l_1 + l_2 - 1) + 1 + \dots + 2(l_1 + l_2 - k) + 1 = (2l_1 + 1)(2l_2 + 1). \quad (5.152)$$

Iz jednakosti

$$\sum_{i=0}^k 2(l_1 + l_2 - i) + k + 1 = (2l_1 + 2l_2 - k + 1)(k + 1), \quad (5.153)$$

rešavanjem jednačine se dobija da je broj koraka:

$$k = l_1 + l_2 \pm |l_1 - l_2|. \quad (5.154)$$

Ovoj vrednosti k odgovara minimalna vrednost momenta impulsa,

$$j_{min} = l_1 + l_2 - k = |l_1 - l_2|, \quad (5.155)$$

a maksimalna, je, kao što smo videli,

$$j_{max} = l_1 + l_2. \quad (5.156)$$

5.7 Identične čestice

Identične čestice su one čestice kojima su sve unutrašnje karakteristike kao što su masa, spin, izospin itd, iste. Ipak u klasičnoj mehanici čestice, kao što kažu Landau i Lifshitz, i kada su iste "ne gube svoju individualnost"⁷, tj. u principu mogu da se razlikuju: na primer kada opisujemo kretanje bilijarskih kugli, svaku možemo da obojimo različitom bojom. Dok klasične čestice možemo da razlikujemo po trajektoriji (po položaju i brzini u svakom trenutku vremena), trajektorija u kvantnoj mehanici nema smisla zbog relacija neodređenosti. Postulat o nerazličivosti identičnih čestica je u stvari

Šesti princip kvantovanja: IDENTIČNE ČESTICE NE MOGU SE NIKAKVIM MERENJEM RAZLIKOVATI. STANJA IDENTIČNIH ČESTICA SU SIMETRIČNA NA IZMENU SVAKE DVE ČESTICE U SLUČAJU BOZONA, A ANTISIMETRIČNA U SLUČAJU FERMIONA.

Ovo je poslednji princip kvantne mehanike, i njegovo pravo objašnjenje daje kvantna teorija polja. U tom (relativističkom) opisu identične čestice su ekscitacije, kvanti istog polja i zato se ne mogu razlikovati: polje je jedinstveni fizički entitet, ne čestice. Druga posledica relativističkog opisa je da ne važi zakon održanja broja čestica koji u kvantnoj mehanici podrazumevamo: u prirodi ovaj zakon je narušen u procesima kreacije i anihilacije.

Da bismo u okviru kvantne mehanike precizno formulisali šesti postulat, da vidimo kako se on matematički izražava. Označimo vektor stanja sistema N identičnih čestica sa

$$|\Psi\rangle = |1, \dots, k, \dots, l, \dots, N\rangle. \quad (5.157)$$

Ova oznaka u stvari samo prebrojava čestice po nekom utvrđenom redosledu. Međutim iz nje se vidi da, ako važi princip nerazličivosti, stanje $|\Psi\rangle$ ne sme da se razlikuje od stanja koje se dobija proizvoljnom permutacijom čestica: odgovarajuća grupa simetrije je *grupa permutacija* N

⁷L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, Addison-Wesley, 1958.

objekata, S_N . Najjednostavniji elementi ove grupe su *transpozicije* koje predstavljaju zamenu dva objekta. Označimo sa P_{kl} zamenu čestice k i čestice l :

$$P_{kl}|1, \dots, k, \dots, l, \dots, N\rangle = |1, \dots, l, \dots, k, \dots, N\rangle. \quad (5.158)$$

Broj transpozicija u grupi S_N je $N(N-1)/2$, dok je ukupan broj permutacija $N!$. Očigledno, kad dva puta primenimo P_{kl} dobijamo početni raspored: $P_{kl}^2 = I$. Dalje, svaka permutacija se može razložiti na transpozicije, iako ovo razlaganje nije jedinstveno: parnost broja transpozicija je u svim razlaganjima ista. Parnost broja transpozicija odnosno *parnost permutacije* P označavaćemo sa $(-1)^p$.

Da bi postulat identičnosti važio dinamički, hamiltonijan sistema identičnih čestica ne sme da se menja pri izmeni dve čestice odnosno mora da komutira sa permutacijama,

$$[P_{kl}, H] = 0, \quad P_{kl}HP_{kl} = H. \quad (5.159)$$

Operatori koji zadovoljavaju (5.159) zovu se *simetrični operatori*. Ako se ograničimo na dvočestične interakcije, hamiltonijan sistema identičnih čestica ima oblik

$$H = \sum_k \frac{p_k^2}{2m} + \sum_k U(\vec{r}_k, s_k) + \sum_{kl} V(|\vec{r}_k - \vec{r}_l|) + \sum_{kl} \beta \vec{s}_k \cdot \vec{s}_l + \dots \quad (5.160)$$

Međutim postulat o nerazličivosti čestica definisan je na kinematičkom nivou. Ima više načina da se implementira nerazličivost čestica na nivou prostora stanja. Jedan je da pođemo od prostora stanja N različitih čestica, $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \dots \mathcal{H}$, pa da nerazličivost nametnemo kao dodatni uslov. Drugi način je da prostor konstruišemo tako da su čestice nerazličive automatski odnosno po konstrukciji: takav prostor stanja naziva se *Fock-ov prostor* a odgovarajući postupak *druga kvantizacija*. Fock-ov prostor se koristi u kvantnoj teoriji polja jer, po konstrukciji, sadrži stanja koja mogu imati proizvoljan broj čestica (kvanata polja). Mi ćemo se zadržati na prvom pristupu, u skladu sa idejom da je u nerelativističkoj kvantnoj mehanici broj čestica fiksan. Razmotrimo talasnu funkciju (5.158),

$$\Psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots \vec{r}_N, s_N), \quad (5.161)$$

koja opisuje stanje N čestica. Operator izmene čestica k i l može se reprezentovati delovanjem na talasnu funkciju tako što menja mesto argumentima \vec{r}_k, s_k i \vec{r}_l, s_l :

$$P_{kl}\Psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots \vec{r}_N, s_N) = \Psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots \vec{r}_N, s_N).$$

Očigledno, P_{kl} je unitaran i $P_{kl}^2 = I$: to znači da su svojstvene vrednosti operatora izmene ± 1 . Princip nerazličivosti kaže da se stanja kod kojih su dve idenične čestice zamenjene ne mogu da razlikovati. Drugim rečima, fizička stanja sistema identičnih čestica su svojstvena stanja operatora izmene P_{kl} ,

$$P_{kl}\Psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots \vec{r}_N, s_N) = \pm \Psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots \vec{r}_N, s_N). \quad (5.162)$$

Pri tome, čestice iste vrste moraju da imaju istu vrednost faktora, $+1$ odnosno -1 , jer u suprotnom linearna kombinacija dva stanja ne bi bila dozvoljeno fizičko stanje. Promena znaka talasne funkcije vezana je, videli smo u postulatu, za celobrojnost spina. Kod čestica celobrojnog spina, *bozona*, $P_{kl}\Psi_b = \Psi_b$, a kod *fermiona* odnosno čestica polucelog spina važi $P_{kl}\Psi_f = -\Psi_f$. Ovo svojstvo je u kvantnoj mehanici fenomenološka osobina; u kvantnoj teoriji polja se može izvesti odnosno povezati sa kanonskim komutacionim relacijama.

Dakle, princip nerazličivosti kaže da sva stanja sistema više identičnih čestica pripadaju jednom od dva svojstvena potprostora (5.162) operatora P_{kl} . To matematički znači da, da bismo dobili prostor stanja identičnih čestica, tenzorski proizvod jednočestičnih prostora $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \dots \mathcal{H}$ treba da projektujemo na jedan od dva potprostora koji opisuju fizička stanja. Relativno je jednostavno definisati projektore na ove potprostore, odnosno operatore koji simetrizuju ili antisimetrizuju talasnu funkciju. Oni su dati izrazima

$$S = \frac{1}{N!} \sum_P P, \quad A = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^p P. \quad (5.163)$$

S i A su međusobno ortogonalni projektori, što se lako može pokazati korišćenjem činjenice da je parnost proizvoda permutacija zbir njihovih parnosti,

$$P'' = PP' \Rightarrow (-1)^{p''} = (-1)^{p+p'}, \quad (5.164)$$

kao i da permutacije čine grupu.

Proanalizirajmo simetrizaciju i antisimetrizaciju u najjednostavnijem slučaju dve čestice koje su u stanjima $|\psi\rangle$ i $|\varphi\rangle$. Ako su čestice različite, stanje kompozitnog sistema je opisano talasnom funkcijom

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_2). \quad (5.165)$$

Međutim ako su čestice identične, $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ nije fizičko stanje jer se menja pri delovanju operatora izmene,

$$P_{12} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = P_{12} \psi(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2)\varphi(\vec{r}_1). \quad (5.166)$$

Zapravo, zavisno od toga da li su čestice bozoni ili fermioni imamo dve mogućnosti da opišemo sistem

$$\Psi_b(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_2) + \psi(\vec{r}_2)\varphi(\vec{r}_1)), \quad (5.167)$$

ili

$$\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_2) - \psi(\vec{r}_2)\varphi(\vec{r}_1)). \quad (5.168)$$

Konstanta normiranja je jednaka $1/\sqrt{2}$ samo kada su funkcije ψ i φ međusobno ortogonalne. Gornji izrazi mogu se dobiti iz početne talasne funkcije $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ delovanjem operatora simetrizacije S odnosno antisimetrizacije A :

$$S = \frac{1}{2}(I + P_{12}), \quad A = \frac{1}{2}(I - P_{12}). \quad (5.169)$$

Lako se vidi se da se u opštem slučaju fermionska talasna funkcija, pošto je antisimetrična, može napisati kao determinanta (*Slater-ova determinanta*):

$$\Psi_f = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \psi_1(\vec{r}_N) \\ \psi_2(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \psi_2(\vec{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_N(\vec{r}_1) & \psi_N(\vec{r}_2) & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix}. \quad (5.170)$$

Isto tako je jasno da, ako su dva od stanja ψ_1, \dots, ψ_N ista, fermionska talasna funkcija je identički jednaka nuli. Ovo se naziva *Pauli-jev princip isključenja*: dva identična fermiona ne mogu se naći u istom kvantnom stanju.

Fizički efekti principa nerazličivosti su brojni i važni. U nekim slučajevima čisto kinematički efekti simetrizacije ili antisimetrizacije talasne funkcije se (kolokvijalno) interpretiraju kao dinamika: tada govorimo o *izmenskoj interakciji*. Kao prvi primer izmenske interakcije razmotrićemo stanja dve čestice zanemarujući njihov spin. Uzmimo da su, zbog jednostavnosti,

čestice u stanjima opisanim talasnim funkcijama ψ i φ koje su međusobno ortogonalne, normirane i parne. Izračunajmo verovatnoću da su obe čestice lokalizovane u potprostoru $z > 0$. Ako su čestice različite, videli smo, njihova talasna funkcija je (5.165) pa je tražena verovatnoća

$$\int_{z_1>0} \int_{z_2>0} |\Psi|^2 dV_1 dV_2 = \int_{z_1>0} |\psi|^2 dV_1 \int_{z_2>0} |\varphi|^2 dV_2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{4},$$

zbog pretpostavljene osobine parnosti talasnih funkcija. Ako su čestice bozoni, njihova talasna funkcija je (5.167), pa se za traženu verovatnoću dobija

$$\int_{z_1>0} \int_{z_2>0} |\Psi_b|^2 dV_1 dV_2 = \frac{1}{4} (1 + |S|^2), \quad (5.171)$$

gde je S integral preklapanja (talasnih funkcija),

$$S = \int \psi^*(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) dV = 2 \int_{z>0} \psi^*(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) dV. \quad (5.172)$$

Lako se vidi da je u slučaju fermionske talasne funkcije rezultat $(1/4)(1 - |S|^2)$. Znači, verovatnoća lokalizacije dva identična bozona u istom delu prostora je veća je nego verovatnoća lokalizacije različitih čestica, dok je kod fermiona verovatnoća manja: kao da se bozoni efektivno privlače, a fermioni odbijaju. Razume se, ovo nije posledica realne interakcije ni interakcionog hamiltonijana: efekat je čisto kinematički. Iz formula koje smo dobili vidimo da su efekti simetrizacije i antisimetrizacije talasne funkcije praktično zanemarljivi ako je integral preklapanja mali, na primer ako su čestice međusobno veoma udaljene: tada se postulat o identičnim česticama za većinu praktičnih računa može zanemariti.

Kao drugi primer izmenske interakcije uzmimo sistem dva elektrona u atomu ili molekulu. Ako su elektroni van magnetnog polja i kreću se nerelativistički, odgovarajući hamiltonijan i Schrödinger-ova jednačina ne zavise od spina, i svojstvene funkcije energije su proizvodi spinske i orbitne talasne funkcije,

$$\Psi(\vec{r}_1, s_1; \vec{r}_2, s_2) = \chi(s_1, s_2) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (5.173)$$

Operator izmene deluje nezavisno na χ i ψ pa svaka od ovih funkcija mora biti svojstvena za P_{12} . Pošto su u pitanju fermioni to znači da, ako je spinska funkcija antisimetrična, orbitna mora biti simetrična i obrnuto. Najniža svojstvena stanja energije su oblika

$$\psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \otimes |s = 0, m_s = 0\rangle, \quad \psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \otimes |s = 1, m_s = 0, \pm 1\rangle, \quad (5.174)$$

gde su ψ_s i ψ_a simetrična odnosno antisimetrična funkcija, jer je spinsko stanje $|s = 0, m_s = 0\rangle$ antisimetrično a sva tri stanja $|s = 1, m_s\rangle$ su simetrična. Znači, iako spin ne figuriše eksplicitno u hamiltonijanu, vrednosti energije od njega zavise posredno, preko antisimetrizacije ukupne talasne funkcije.

Na osnovu gornjih zaključaka možemo da analiziramo svojstvena stanja atoma helijuma, koji ima dva elektrona. Hamiltonijan koji opisuje kretanje elektrona je

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad (5.175)$$

$Z = 2$. Ako u prvoj aproksimaciji zanemarimo elektrostatičku interakciju elektrona, vidimo da je hamiltonijan zbir dva nezavisna hamiltonijana za elektrone u vodoniku-sličnom atomu

čija svojstvena stanja možemo da označimo sa $|nlm\rangle \otimes |m_s\rangle$. Na osnovu prethodne diskusije dobijamo da je osnovno stanje helijuma nedegenerisano, opisano talasnom funkcijom

$$|100\rangle_1 \otimes |100\rangle_2 \otimes |s=0, m_s=0\rangle, \quad (5.176)$$

jer se prostorni deo talasne funkcije može samo simetrizovati. Ima 16 stanja koja odgovaraju sledećem, prvom pobuđenom nivou energije; to su

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|100\rangle_1 \otimes |2lm\rangle_2 + |2lm\rangle_1 \otimes |100\rangle_2 \right) \otimes |s=0, m_s=0\rangle, \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|100\rangle_1 \otimes |2lm\rangle_2 - |2lm\rangle_1 \otimes |100\rangle_2 \right) \otimes |s=1, m_s=0, \pm 1\rangle. \end{aligned}$$

Stanja helijuma u kojima je ukupni elektronski spin $s=0$ nazivaju se parahelijum, a ona kod kojih je $s=1$, ortohelijum. Uračunavanjem dodatne potencijalne energije interakcije elektrona, na primer perturbativnim računom, dobija se da stanja ortohelijuma imaju nižu energiju od stanja parahelijuma, a prvi pobuđeni nivo se zapravo razdvaja na četiri.

Izuzetno važna primena Pauli-jevog principa je objašnjenje periodnog sistema elemenata. Videli smo da stanja elektrona u Coulomb-ovom potencijalu jezgra zavise od kvantnih brojeva $|nlm_l m_s\rangle$ a energija, pošto je potencijal oblika $1/r$, zavisi samo od n . Degeneracija po energiji je prema tome $2n^2$, a stanja, po rastućoj vrednosti energije u vodoniku sličnim atomima obeležavamo kao

$$\begin{aligned} & 1s \\ & 2s \ 2p \\ & 3s \ 3p \ 3d \\ & 4s \ 4p \ 4d \ 4f \\ & \dots \end{aligned}$$

Ova šema energetskih nivoa i Pauli-jev princip objašnjavaju periodni sistem elemenata u najgrubljim crtama. Naime, pošto su elektroni fermioni, dva elektrona ne mogu da budu u istom stanju pa se pri "građenju" atoma sve višeg atomskog broja redom popunjavaju viši energetski nivoi. Energetski napovoljnije konfiguracije, odnosno najstabilniji atomi, su oni koji imaju popunjene cele *ljuske*, tj. sva stanja za fiksiranu vrednost energije E_n . Sa druge strane, hemijske osobine atoma opisane su u najvećoj meri stanjima elektrona najviše energije koji su po pravilu "špolja", tj. imaju najveće očekivane vrednosti radijusa $\langle r \rangle$ i najmanje energije vezivanja, pa dominantno interaguju sa drugim atomima ili jonima.

Znači, vrednosti n definišu periode u periodnom sistemu. U prvoj periodi su vodonik i helijum. Osim He, elementi koji imaju popunjene ljuske su ostali *inertni gasovi*: Ne, Ar, Kr, Xe. Elementi koji imaju po 1 ili 2 elektrona viška u odnosu na popunjene ljuske su metali jer lako gube elektrone. Prvu grupu u periodnom sistemu čine *alkalni metali*, Li, Na, K, Rb, Cs, a drugu, *alkalne zemlje*, Be, Mg, Ca, Str itd. Elementi koji imaju manjak od jednog elektrona takođe su veoma reaktivni ali nemetali – to su *halogeni elementi*, F, Cl, Br, I.

Iz malo detaljnijeg pregleda treće periode vidimo da pravi redosled stanja energije u atomima nije isti kao onaj dat gore za vodonikov atom. U višeelektronskom atomu, osim interakcije sa jezgrom, elektroni interaguju i međusobno, i to elektronsko odbijanje nije zanemarljivo. U najjednostavnijoj, jednočestičnoj (Hartree-jevovj) aproksimaciji ono se može predstaviti preko efektivnog ekranirajućeg elektrostatičkog potencijala, na primer

$$U_1(r) = -\frac{Ze}{r} e^{-ar}, \quad U_2(r) = -\frac{Z(r)e}{r}. \quad (5.177)$$

Prvi potencijal $U_1(r)$ zove se Yukawa-in; u drugom, $U_2(r)$, ekraniranje je opisano efektivnim naelektrisanjem $Z(r)$, i oba ćemo koristiti za opis višeelektronskih atoma kasnije. U slučaju nekulonovskih potencijala degeneracija energije po l se uklanja i dobijamo sledeći redosled stanja po energiji:

$$\begin{aligned} &1s \\ &2s \ 2p \\ &3s \ 3p \\ &4s \ 3d \ 4p \\ &5s \ 4d \ 5p \\ &6s \ 4f \ 5d \ 6p \\ &7s \ 5f \ 7p \ 6d. \end{aligned}$$

Posle nobelijuma koji ima $Z = 102$, jezgra usled odbijajuće Coulomb-ove interakcije protona postaju nestabilna pa tih elemenata nema u prirodi. Interesantno je još zapaziti položaj $4f$ i $5f$ stanja, koja imaju male "poluprečnike orbita" odnosno očekivane vrednosti $\langle r \rangle$ su im manje od odgovarajućih vrednosti za $6s$ i $7s$ stanja. Pošto su svi f -elektroni "unutra", popunjavanje f -stanja skoro uopšte ne menja hemijske osobine pa su svih 14 elemenata od La ($Z = 57$) do Yb ($Z = 70$), *lantanidi*, veoma slični. Slično je sa *aktinidima*, elementima od Ac ($Z = 89$) do No ($Z = 102$).

Model ljuski daje, u nekoj meri, i objašnjenje stabilnosti jezgara. Kada se posmatraju nuklearni raspadi vidi se da postoje jezgra koja su posebno stabilna, tzv. *magična jezgra*: He^2 , O^{16} , Ca^{40} . Odgovarajući brojevi protona, 2, 8, 20, nazivaju se *magični brojevi*. Objašnjenje stabilnosti magičnih jezgara je slično objašnjenju stabilnosti inertnih gasova: ova jezgra imaju popunjene ljuske. Međutim, jezgro se razlikuje od atoma po tome što unutar jezgra nemamo masivni centar: svi nukleoni su približno iste mase. Zato, ako usrednjenu interakciju svih nukleona prikazemo u Hartree-jevoj aproksimaciji kao jednočestični potencijal $U(r)$, za mala međusobna rastojanja približno važi razvoj do drugog reda po r ,

$$U(r) = C + \frac{1}{2} m_p \omega^2 r^2. \quad (5.178)$$

Naravno potencijal u principu zavisi i od drugih parametara: spina, izospina itd, i nije sferno simetričan: formula (5.178) je samo najgrublja aproksimacija. Prva tri energetska nivoa trodimenzionog izotropnog harmonijskog oscilatora imaju, kada se uključe dve moguće vrednosti spina, degeneracije 2, 6, 12, a redosled nivoa energije je u spektroskopskim oznakama

$$\begin{aligned} &1s \\ &2s \ 2p \\ &3s \ 3p \ 3d \\ &\dots \end{aligned}$$

Zato prva popunjena ljuska jezgra ima 2 stanja, druga 8, treća 20 stanja, što objašnjava prva tri magična broja. Za razumevanje stabilnosti ostalih magičnih jezgara potrebno je detaljnije poznavanje i analiza ostalih interakcija nukleona u jezgru.

5.8 SO(4) i simetrije vodonikovog atoma*

Analizirajući spektar energije i svojstvene funkcije sferno simetričnih potencijala dobili smo radialnu jednačinu (4.46) čije rešavanje daje vrednosti energije. Kako jednačina zavisi od momenta impulsa, energije vezanih stanja u principu će zavisiti od l i od n , E_{nl} . Ovo odražava

činjenicu da u sistemu imamo rotacionu simetriju,

$$[L_i, H] = 0, \quad (5.179)$$

pa celi multipleti momenta impulsa $\{|l, m\rangle\}$ za fiksiranu vrednost l , $m = -l, -l+1, \dots, l$, imaju istu energiju, odnosno spektar je degenerisan. Međutim, kod vodonikovog atoma energije ne zavise od l : imamo dodatnu degeneraciju spektra, koja se naziva i slučajna⁸. Uzrok ove degeneracije je činjenica da hamiltonijan ima dodatnu, veću simetriju od rotacione $SO(3)$: simetrija H-atoma za vezana stanja je, kao što ćemo pokazati, $SO(4)$. Dodatni generatori simetrije odnosno konstante kretanja su komponente *Laplace-Runge-Lenz-ovog vektora*,

$$A_i = \frac{1}{2m} \epsilon_{ijk} (p_j L_k + L_k p_j) - Z e^2 \frac{x_i}{r}. \quad (5.180)$$

Izraz (5.180) je, do na simetrizaciju proizvoda p_j i L_k , isti kao u klasičnoj mehanici: simetrija $1/r$ -potencijala bila je otkrivena još u vreme njenog zasnivanja. Iste godine kada i Schrödinger, 1926, Pauli je odredio spektar energije elektrona u vodonikovom atomu čisto algebarski: mi ćemo kratko proći kroz to izvođenje, ako ništa drugo iz istorijskih razloga.

Na osnovu definicije (5.180) lako se mogu pokazati dve osobine Laplace-Runge-Lenz-ovog vektora:

$$[A_i, H] = 0, \quad \vec{L} \cdot \vec{A} = 0. \quad (5.181)$$

Da bismo tačno odredili grupu simetrije treba da nađemo odgovarajuću algebru tj. sve međusobne komutatore konstanti kretanja. Već znamo komutatore operatora momenta impulsa,

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k, \quad (5.182)$$

a pošto je \vec{A} vektor, važi

$$[L_i, A_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} A_k. \quad (5.183)$$

Ostaje da se odredi komutator $[A_i, A_j]$. Malo dužim ali direktnim računom se dobija

$$[A_i, A_j] = -i\hbar \frac{2H}{m} \epsilon_{ijk} L_k. \quad (5.184)$$

Očigledno, ako levu stranu ove jednačine podelimo sa H (što možemo jer $[A_i, H] = 0$), na desnoj strani će ostati komponente momenta impulsa L_i . Uvođenjem vektora

$$A'_i = \frac{A_i}{\sqrt{-\frac{2H}{m}}} \quad (5.185)$$

u slučaju stanja *diskretnog spektra* odnosno negativnih svojstvenih vrednosti energije $E < 0$, iz (5.184) dobijamo

$$[A'_i, A'_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k. \quad (5.186)$$

Za *kontinualni deo spektra*, $E > 0$, definišemo

$$A'_i = \frac{A_i}{\sqrt{\frac{2H}{m}}} \quad (5.187)$$

i imamo

$$[A'_i, A'_j] = -i\hbar \epsilon_{ijk} L_k. \quad (5.188)$$

⁸Drugi sferno simetrični sistem koji ima slučajnu degeneraciju spektra je izotropni trodimenzioni harmonijski oscilator: njegova grupa simetrije je $U(3)$.

To znači da je za diskretni spektar grupa simetrije $SO(4)$, a za kontinualni spektar $SO(1,3)$. Direktno iz definicije Laplace-Runge-Lenz-ovog vektora dobija se važna relacija

$$A^2 = Z^2 e^4 + \frac{2H}{m} (L^2 + \hbar^2). \quad (5.189)$$

Zadržaćemo se na stanjima diskretnog spektra. Grupa $SO(4)$ je direktni proizvod, $SO(4) = SO(3) \otimes SO(3)$, a generatori faktor grupa su

$$M_i = \frac{1}{2} (L_i + A'_i), \quad N_i = \frac{1}{2} (L_i - A'_i), \quad [M_i, N_j] = 0. \quad (5.190)$$

Zbog ovakve strukture, ireducibilne reprezentacije grupe $SO(4)$ su proizvodi ireducibilnih reprezentacija faktor grupa. To znači da se mogu označiti kvantnim brojevima operatora M^2 i N^2 , (j_1, j_2) , a jedan bazis u prostoru svake ireducibilne reprezentacije je $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$.

Jasno je da diferencijalni operatori L_i i A'_i u prostoru stanja negativne energije zadaju reprezentaciju grupe $SO(4)$ koja je unitarna (L_i i A'_i su hermitski) i reducibilna (jer je beskonačnodimenziona). Osim toga, važi dodatna relacija (5.181) iz koje sledi

$$M_i M_i = \frac{1}{4} (L_i L_i + A'_i A'_i) = N_i N_i. \quad (5.191)$$

To znači da, kada reprezentaciju H-atoma grupe $SO(4)$ razložimo na ireducibilne (j_1, j_2) , za svaku komponentu važi $j_1 = j_2 = j$. Iz (5.191) imamo

$$4M^2 = 4N^2 = L^2 - \frac{m}{2H} A^2, \quad (5.192)$$

pa delovanjem operatorom $4M^2$ na stanje $|j, m_1, j, m_2\rangle$, iz (5.189) dobijamo

$$4\hbar^2 j(j+1) |j, m_1, j, m_2\rangle = \left(-\hbar^2 - \frac{mZ^2 e^4}{2H} \right) |j, m_1, j, m_2\rangle. \quad (5.193)$$

Znači stanja $|j, m_1, j, m_2\rangle$ su svojstvena stanja energije,

$$H |j, m_1, j, m_2\rangle = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(2j+1)^2} |j, m_1, j, m_2\rangle. \quad (5.194)$$

Iz poslednje formule se vidi da je kvantni broj energije $n = 2j + 1$, i da je degeneracija nivoa $n^2 = (2j + 1)^2$. Svojstvena stanja H-atoma $|j, m_1, j, m_2\rangle$, očigledno, nisu svojstvena za moment impulsa L^2 : dobijaju kada se Schrödinger-ova jednačina za atom vodonika rešava u paraboličkim koordinatama⁹.

5.9 Izospin

I u prirodi i u umetnosti simetrija znači invarijantnost objekta na skup (grupu) transformacija; u kvantnomehaničkom sistemu degeneracija energije ukazuje na simetriju. Važan korak za uvođenje i razvoj pojma *unutrašnje simetrije* učinjen je 1932. godine kada je Chadwick eksperimentalno otkrio neutron, treću česticu koja sa elektronom i protonom gradi atom. Eksperimentalno izmerena masa neutrona je do na 0.1% jednaka masi protona:

	masa	spin	naelektrisanje
proton	939.565 MeV	1/2	-e
neutron	938.272 MeV	1/2	0

⁹Kao referencu za to izvođenje preporučujemo klasik: H. A. Bethe, E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One-And Two-Electron Atoms*, Martino Publishing, 2014.

Protoni i neutroni grade jezgro: redni broj atoma Z jednak je broju protona odnosno naelektrisanju jezgra, $-Ze$, a atomski broj A proporcionalan je ukupnoj masi jezgra, $A = Z + N$, gde je N broj neutrona u jezgru.

Nekoliko meseci posle otkrića neutrona Heisenberg je predložio da približnu jednakost masa protona i neutrona treba interpretirati kao simetriju: proton i neutron su zapravo dva stanja iste čestice, *nukleona*, slično kao što su $|+\rangle$ i $|-\rangle$ dva spinska stanja elektrona. Ovu novu simetriju po analogiji sa spinom Wigner je 1935. nazvao izobarski spin ili *izospin*. Za razliku od spina koji se manifestuje pri rotacijama, izospinske transformacije nisu povezane sa prostorom: one mešaju komponente talasne funkcije ne menjajući prostorne koordinate. Zbog mnogih teorijskih i matematičkih sličnosti pretpostavljeno je da je grupa simetrije koja opisuje izospin grupa $SU(2)$, a da su proton i neutron stanja koja pripadaju najmanjem multipletu ove grupe – dubletu:

$$|p\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_p \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_n \end{pmatrix}, \quad (5.195)$$

ili ako pišemo samo deo talasne funkcije koji pripada "unutrašnjem" tj. izospinskom prostoru,

$$|p\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |n\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.196)$$

Izospin kao i moment impulsa ima tri komponente, tri opservable T_i koje zadovoljavaju komutacione relacije

$$[T_i, T_j] = i\epsilon_{ijk} T_k, \quad T^2 = T_i T_i. \quad (5.197)$$

Proton i neutron su svojstvena stanja treće komponente izospina T_3 sa svojstvenim vrednostima $t_3 = \pm 1/2$. Za proton i neutron opservable izospina su date Pauli-jevim matricama,

$$T_i = \frac{1}{2} \sigma_i. \quad (5.198)$$

Razlika između protona i neutrona može se izraziti i pomoću njihovog naelektrisanja Q : lako se proverava da važi formula

$$Q = \left(\frac{A}{2} + T_3 \right) |e|, \quad (5.199)$$

gde je A broj nukleona: $A = 1$ u oba stanja, $|p\rangle$ i $|n\rangle$. Iz analogije sa operatorom ugaonog momenta sledi da se, u sistemu više čestica, vrednost opservable T_3 sabira, tj. t_3 je aditivni kvantni broj. Za kvantni broj t kvadrata izospina, T^2 , pri sabiranju (kompoziciji) čestica sa izospinom t' i t'' važi, po analogiji¹⁰, da može imati vrednosti $t = |t' - t''|, |t' - t''| + 1, \dots, t' + t''$.

Hipoteza izospina odnosno postojanja unutrašnjih simetrija ima ogroman konceptualni značaj u fizici elementarnih čestica, kao i mnogobrojne posledice; mi ćemo neke od njih pomenuti, ukratko. Pre svega, jasno je da iskaz da su proton i neutron stanja iste čestice" nije u potpunosti tačan jer se oni različito ponašaju u električnom polju. Elektromagnetna interakcija narušava izospinsku simetriju jer zavisi od naelektrisanja Q odnosno od T_3 , pa ne komutira sa svim komponentama opservable izospina \vec{T} . *Narušenje simetrije* je drugi veoma značajan koncept koji je istakla kvantna mehanika, mada razume se nije nov: npr. očigledno je da je simetrija većine klasičnih objekata u prirodi u stvari približna, tj. malo narušena. Kao mera narušenja izospinske simetrije u nuklearnoj fizici uzima se razlika masa protona i neutrona:

$$\frac{m_p - m_n}{m_p} \sim 0.14\%. \quad (5.200)$$

¹⁰U stvari nije reč o analogiji: matematička struktura je identična.

Pošto jake interakcije imaju izospinsku simetriju, hamiltonijan koji ih opisuje zavisi samo od T^2 . Obično se pretpostavlja da je oblika

$$H = I \otimes f(r) + T^2 \otimes g(r). \quad (5.201)$$

Ali postoji mnogo fenomena u nuklearnoj fizici koji se mogu objasniti samom simetrijom, tj. bez preciznog poznavanja interakcije (5.201); navešćemo nekoliko primera.

Najjednostavnije vezano stanje dva nukleona je *deuteron* koji se sastoji od protona i neutrona,

$$A_d = 2, \quad Q_d = |e| \quad \Rightarrow \quad t_3 = 0. \quad (5.202)$$

Pošto je osnovno stanje deuteronu izospinski singlet $t = 0$, ono je simetrično na izmenu nukleona. Iz Pauli-jevog principa odmah sledi da je spinsko stanje deuteronu triplet, $s = 1$. Sva stanja izospinskog tripleta, $|pp\rangle$, $(|pn\rangle - |np\rangle)/\sqrt{2}$ i $|nn\rangle$, u prirodi su nestabilna.

Sledeći važan primer izospinskog multipleta je par jezgara vodonika H^3 ($Z = 1, N = 2$) i helijuma He^3 ($Z = 2, N = 1$). Ona u osnovnom stanju ($s = 1/2$) imaju skoro jednake energije, i relativno jednostavno možemo da vidimo da predstavljaju dublet u odnosu na izospin jer

$$A_{\text{H}^3, \text{He}^3} = 3, \quad Q_{\text{H}^3, \text{He}^3} = |e|, 2|e|, \quad (5.203)$$

pa iz (5.199) sledi

$$(t_3)_{\text{H}^3, \text{He}^3} = \mp \frac{1}{2}. \quad (5.204)$$

Slično je i sa drugim *ogledalskim jezgrima* koja se razlikuju zamenom $Z \leftrightarrow N$. Uzmimo na primer osnovna stanja jezgara bora B^{12} ($Z = 5, N = 7$) i azota N^{12} ($Z = 7, N = 5$) koja imaju spin $s = 1$. Dobijamo da je

$$(t_3)_{\text{B}^{12}, \text{N}^{12}} = (5, 7) - 6 = \mp 1. \quad (5.205)$$

Postoji i treće stanje ovog izospinskog tripleta sa $t_3 = 0$ koje ima skoro istu vrednost energije: to je prvo pobuđeno stanje jezgra ugljenika C^{12} ($Z = 6, N = 6$). Ovo stanje takođe ima spin $s = 1$, za razliku od osnovnog stanja jezgra ugljenika koje ima spin $s = 0$.

Osim nukleona i jezgara, izospin je osobina ostalih teških čestica koje interaguju jakom interakcijom – *hadrona*. Najlakše čestice koje jako interaguju su *pioni*, triplet π -mezona:

	masa	spin	naelektrisanje	t_3
π^+	139.6 MeV	0	-e	1
π^0	135.0 MeV	0	0	0
π^-	139.6 MeV	0	e	-1

Iz formule (5.199) se vidi da je za ovaj multiplet vrednost izospina $t = 1$ jer je $A = 0$. Stanja piona u izospinskom prostoru mogu da se identifikuju kao

$$|1, 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -|\pi^+\rangle, \quad |1, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\pi^0\rangle, \quad |1, -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\pi^-\rangle.$$

Drugi karakteristični izospinski multiplet je multiplet Δ -bariona za koji je $t = 3/2$ ¹¹:

¹¹ Tabele sa navedenim vrednostima preuzete su iz udžbenika W. Greiner, B. Müller, *Quantum Mechanics, Symmetries*, Springer 1994, čiji je veliki deo posvećen unutrašnjim simetrijama.

	masa	spin	naelektrisanje	t_3
Δ^{++}	$1232 \pm 2 \text{ MeV}$	$3/2$	$-2e$	$3/2$
Δ^+	$1232 \pm 2 \text{ MeV}$	$3/2$	$-e$	$1/2$
Δ^0	$1232 \pm 2 \text{ MeV}$	$3/2$	0	$-1/2$
Δ^-	$1232 \pm 2 \text{ MeV}$	$3/2$	e	$-3/2$

Izospinska simetrija omogućava da se nađu relativne širine za određene sudare i raspade čiji je mehanizam jaka interakcija. Pretpostavimo da želimo da odredimo verovatnoću raspada, ili prelaza iz početnog stanja sistema $|\Psi(0)\rangle = |\psi\rangle$ u stanje $|\chi\rangle$ u kasnijem trenutku t . Ova verovatnoća je određena projekcijom

$$\langle\chi|\Psi(t)\rangle = \langle\chi|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi\rangle = \langle\chi|S|\psi\rangle \quad (5.206)$$

odnosno matričnim elementom operatora evolucije. Pretpostavimo dalje da je hamiltonijan invarijantan na izospinske transformacije, tj. da je oblika (5.201) i zavisi samo od T^2 . Ako su stanja $|\chi\rangle$ i $|\psi\rangle$ svojstvena stanja izospina,

$$|\chi\rangle = |\tau', t', t'_3\rangle, \quad |\psi\rangle = |\tau, t, t_3\rangle \quad (5.207)$$

lako se vidi da je

$$\langle\chi|S|\psi\rangle = \delta_{\tau'\tau} \delta_{t_3't_3} \langle\tau', t' || S || \tau, t\rangle, \quad (5.208)$$

gde redukovani matrični element $\langle\tau', t' || S || \tau, t\rangle$ ne zavisi od projekcije izospina. (5.208) je posledica održanja izospina, ili opštije, zapis Wigner-Eckart-ove teoreme za skalarni operator; njen precizan iskaz dat je u dodatku. U slučaju raspada i rasejanja, izraz (5.208) nam daje *selekciona pravila*, odnosno određuje koji su raspadi zabranjeni (imaju verovatnoću nula). Osim toga, kao što se vidi u primeru datom u jednom od zadataka, iz njega možemo dobiti odnose verovatnoća kada upoređujemo procese za koje je redukovani matrični element isti.

Jednostavni eksperimentalni dokaz izospinske invarijantnosti je proces



Sa stanovišta zakona održanja naelektrisanja ovaj proces je dozvoljen; t_3 je takođe, za levu i desnu stranu, isto jer je jezgro helijuma izosinglet. Međutim, ono što je u procesu narušeno je ukupni izospin t : oba deuteronu kao i He^4 su singleti, dok je pion π^0 deo tripleta pa je, u skladu sa (5.208), verovatnoća za (5.209) nula. Zaista, u eksperimentu ovaj proces je potisnut: ima efikasni presek $\sim 10^{-32} \text{ cm}^2$, za šest redova veličine manji od tipičnih vrednosti nuklearnih efikasnih preseka.

5.10 Dodatak

Grupe i reprezentacije grupa

Aksiome koje definišu GRUPU G su:

$$\text{zatvorenost,} \quad g_a, g_b \in G \Rightarrow g_a g_b \in G \quad (5.210)$$

$$\text{postojanje jedinice,} \quad I \in G: I g = g I = g \quad (5.211)$$

$$\text{postojanje inverza,} \quad g^{-1} \in G: g g^{-1} = g^{-1} g = I \quad (5.212)$$

$$\text{asocijativnost,} \quad g_a(g_b g_c) = (g_a g_b) g_c. \quad (5.213)$$

Redosled množenja u grupi je bitan jer množenje u principu nije komutativno, $g_a g_b \neq g_b g_a$. Sa druge strane, asocijativnost između ostalog znači da se elementi grupe mogu prikazati kao matrice ili operatori. Broj elemenata grupe može biti konačan ili beskonačan: važan slučaj je kada elementi grupe pripadaju tj. mogu se parametrizovati tačkama neke mnogostrukosti. Tada se gornjim aksiomama, koje definišu algebarsku strukturu grupe, dodaju geometrijske aksiome koje definišu njenu topološku strukturu.

LIE-JEVU GRUPU čine elementi $g(a) \equiv g(a_1, \dots, a_n)$, $(a_1, \dots, a_n) \in M^n \subset \mathbb{R}^n$, koji imaju sledeće osobine

$$\text{ako je } g(a)g(b) = g(c), \quad c_i = c_i(a, b) \text{ je diferencijabilna funkcija} \quad (5.214)$$

$$\text{ako je } g^{-1}(a) = g(c), \quad c_i = c_i(a) \text{ je diferencijabilna funkcija.} \quad (5.215)$$

Skoro sve grupe koje se sreću u fizici su grupe matrica sa realnim ili kompleksnim koeficijentima, definisane nekom dodatnom, linearnom, bilinearnom itd, vezom. Navešćemo njihove oznake.

- $GL(n, \mathbb{R}), GL(n, \mathbb{C})$ – opšta linearna grupa, grupa nesingularnih $n \times n$ matrica nad poljem realnih odnosno kompleksnih brojeva.

Najvažnije su grupe matrica koje održavaju neku (nesingularnu, pozitivno-definitnu ili indefinitnu) metriku \mathfrak{g} . Za elemente grupe $g \in G$ onda važi

$$g^\dagger \mathfrak{g} g = \mathfrak{g}. \quad (5.216)$$

Često se dodaje uslov da je determinanta elemenata grupe jednaka jedinici, $\det g = 1$, i tada se grupi dodaje slovo S i naziv "specijalna":

- $O(n), SO(n)$ – ortogonalne i specijalne ortogonalne transformacije, grupe $n \times n$ matrica nad poljem \mathbb{R} koje održavaju euklidsku metriku $\mathfrak{g} = I_n$
- $U(n), SU(n)$ – unitarne i specijalne unitarne matrice, grupe $n \times n$ matrica nad poljem \mathbb{C} koje održavaju euklidsku metriku $\mathfrak{g} = I_n$
- $O(p, q), SO(p, q)$ – ortogonalne i specijalne ortogonalne transformacije, grupe $n \times n$ matrica nad \mathbb{R} koje održavaju indefinitnu metriku $\mathfrak{g} = \mathfrak{I}_{p,q}$. Metrika $\mathfrak{I}_{p,q}$ je dijagonalna matrica sa p elemenata $+1$ i q elemenata -1 , $p + q = n$
- $U(p, q), SU(p, q)$ – unitarne i specijalne unitarne transformacije, grupe $n \times n$ matrica nad \mathbb{C} koje održavaju $\mathfrak{I}_{p,q}$

- $Sp(n, \mathbb{R})$ i $Sp(n, \mathbb{C})$ – *simplektičke* transformacije, grupe $n \times n$ matrica nad poljima \mathbb{R} i \mathbb{C} , metrika g je nesingularna i antisimetrična matrica a n je paran broj.

Grupe koje održavaju euklidske metrike (i odgovarajući skalarni proizvod) su *kompaktne*: njihov prostor parametara je kompaktan odnosno ograničen podskup od \mathbb{R}^n . Sa druge strane, grupe koje održavaju neeuklidske metrike kao što je Lorentz-ova grupa $SO(1,3)$ su nekompatne: ova razlika postaje posebno važna u teoriji reprezentacija.

Svaka Lie-jeva grupa G je homogena, odnosno prostor parametara grupe je *homogeni prostor*: to znači da svaka tačka prostora lokalno izgleda kao svaka druga tačka. Većina osobina Lie-jeve grupe sledi iz ponašanja njenih elemenata u okolini fiksirane tačke. Razvojem elementa u Taylor-ov red u okolini jedinice dobija se

$$T_i = i \left(\frac{\partial g_a}{\partial a_i} \right)_{a_i=0}, \quad (5.217)$$

a T_i su *generatori grupe*. Za infinitezimalne vrednosti parametara, ϵ_i , možemo pisati

$$g_\epsilon = 1 - i \sum \epsilon_i T_i. \quad (5.218)$$

Inverzno linearizaciji je eksponencijalno preslikavanje

$$g_a = e^{-i \sum a_i T_i}. \quad (5.219)$$

Generatori grupe obrazuju LIE-JEVU ALGEBRU \mathcal{G} . Osim sabiranja i množenja skalarom, za Lie-jeve algebre je definisana još jedna operacija, *Lie-jeva zagrada*, koja se u matričnoj reprezentaciji svodi na komutator (pa se tako i označava). Osobine koje definišu Lie-jevu algebru su:

$$\mathcal{G} \text{ je vektorski prostor, } X, Y \in \mathcal{G} \Rightarrow aX + bY \in \mathcal{G} \quad (5.220)$$

$$\text{zatvorenost na } [,], \quad X, Y \in \mathcal{G} \Rightarrow [X, Y] \in \mathcal{G} \quad (5.221)$$

$$\text{antisimetrija, } [X, Y] = -[Y, X] \quad (5.222)$$

$$\text{Jacobi – jev identitet, } [X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] = 0. \quad (5.223)$$

Komutator u algebri je infinitezimalna forma komutatora u grupi, $g_1 g_2 g_1^{-1} g_2^{-1}$; Jacobi-jev identitet sledi iz asocijativnosti grupnog množenja. Osnovna relacija koja određuje Lie-jevu algebru (do na linearne kombinacije generatora) je

$$[T_i, T_j] = i f_{ij}^k T_k. \quad (5.224)$$

Vrednosti *strukturnih konstanti* f_{ij}^k slede iz zakona množenja u grupi, a antisimetričnost i Jacobi-jev identitet daju

$$f_{ij}^k = -f_{ji}^k, \quad f_{ij}^n f_{ln}^k + f_{jl}^n f_{in}^k + f_{li}^n f_{jn}^k = 0. \quad (5.225)$$

Pokazuje se da za određene (poluproste) grupe postoji standardna forma Lie-jeve algebre: u algebri se može izabrati *Cartan-ov bazu* generatora H_i , $E_{\pm\alpha}$ tako da su komutacione relacije oblika

$$\begin{aligned} [H_i, H_k] &= 0, & [H_i, E_\alpha] &= \alpha_i E_\alpha \\ [E_\alpha, E_{-\alpha}] &= \alpha_i H_i, & [E_\alpha, E_\beta] &= N_{\alpha\beta} E_{\alpha+\beta}, \quad \alpha + \beta \neq 0. \end{aligned} \quad (5.226)$$

Generatori H_i obrazuju maksimalnu komutirajuću podalgebru od \mathcal{G} i mogu se istovremeno dijagonalizovati, tako da (u primenama u fizici) daju skup dobrih kvantnih brojeva; $E_{\pm\alpha}$ su operatori podizanja i spuštanja.

REPREZENTACIJA, u širem smislu, je homomorfizam grupe G na grupu transformacija nekog skupa \mathcal{X} , tj. preslikavanje U koje održava zakon množenja u grupi, $U(g_a)U(g_b) = U(g_ag_b)$. Ako je $\mathcal{X} = \mathcal{H}$ vektorski prostor a $U(g)$ linearni operatori, imamo LINEARNU REPREZENTACIJU grupe. *Projektivna reprezentacija* definiše se uslovom $U(g_a)U(g_b) = C(g_a, g_b)U(g_ag_b)$. U kvantnoj mehanici najvažnije su *unitarne reprezentacije* kod kojih su operatori $U(g)$ unitarni, jer unitarni operatori ne menjaju skalarni proizvod. Generatori u unitarnoj reprezentaciji, $U(T_i) = \tau_i$, su hermitski operatori i u principu opisuju fizičke opservable.

Kažemo da su reprezentacije U i U' *ekvivalentne* ukoliko se mogu povezati transformacijom sličnosti S : $U'(g) = S^{-1}U(g)S$. Reprezentacija je *ireducibilna* ako vektorski prostor \mathcal{H} nema invarijantnih potprostora na dejstvo grupe; u suprotnom, reprezentacija je *reducibilna*. Razlaganje reprezentacije na ireducibilne komponente je jedan od osnovnih zadataka teorije reprezentacija, i zavisi od osobina grupe¹². Kod kompaktnih Lie-jevih grupa, sve unitarne ireducibilne reprezentacije su konačnodimenzione, a reducibilne reprezentacije se mogu razložiti na direktni zbir ireducibilnih. U tom slučaju ireducibilne reprezentacije se jednoznačno karakterišu vrednostima Casimir-ovih operatora. *Casimir-ovi operatori* grupe G ili algebre \mathcal{G} su operatori koji komutiraju sa svim generatorima grupe, pa su u ireducibilnim reprezentacijama proporcionalni jedinici.

Izometrije euklidskog prostora

Uvodimo najvažnije izometrije trodimenzionog prostora.

PROSTORNA INVERZIJA P je definisana sa

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = -\vec{r}, \quad t \rightarrow t' = t. \quad (5.227)$$

Očigledno važi $P^2 = 1$, odnosno $P^{-1} = P$: odgovarajuća grupa transformacija je dvočlana,

$G = \{1, P\}$. Ako označimo $\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$, inverzija prostora se reprezentuje matricom,

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (5.228)$$

Lako se vidi da pri inverziji prostora, $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$, $\vec{L} \rightarrow \vec{L}$.

PROSTORNE TRANSLACIJE su definisane vektorom translacije \vec{a} :

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \vec{r} + \vec{a}, \quad t \rightarrow t' = t. \quad (5.229)$$

Očigledno, pri ovoj transformaciji, $\vec{p} \rightarrow \vec{p}$. Grupa translacija je Lie-jeva grupa čiji su elementi parametrizovani komponentama vektora translacije. Grupa je komutativna,

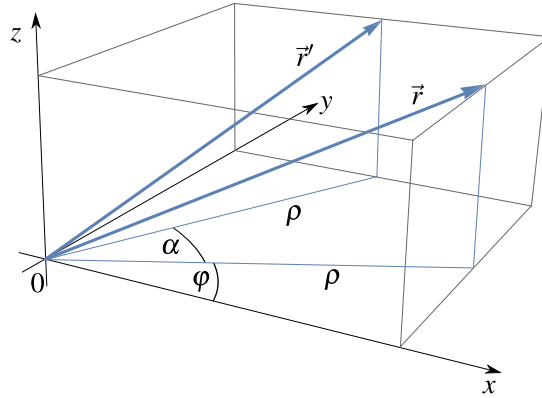
$$g_{\vec{a}}g_{\vec{b}} = g_{\vec{a}+\vec{b}}, \quad g_0 = 1, \quad g_{\vec{a}}^{-1} = g_{-\vec{a}}. \quad (5.230)$$

Izvešćemo kako se pri ROTACIJI oko z -ose za ugao α transformiše vektor položaja, $\vec{r} \rightarrow \vec{r}'$. Ako označimo, $\vec{r} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z = \rho \cos\varphi\vec{e}_x + \rho \sin\varphi\vec{e}_y + z\vec{e}_z$, sa slike 5.1 vidimo da je

$$\vec{r}' = x'\vec{e}_x + y'\vec{e}_y + z'\vec{e}_z = \rho \cos(\varphi + \alpha)\vec{e}_x + \rho \sin(\varphi + \alpha)\vec{e}_y + z\vec{e}_z, \quad (5.231)$$

odnosno

¹²A. A. Kirillov, *Elements of the Theory of Representations*, Springer, 1976.



Slika 5.1: Rotacija oko z -ose za ugao α .

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = R(\alpha, \vec{e}_z) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (5.232)$$

$R(\alpha, \vec{e}_z)$ je matrica rotacije za ugao α oko z -ose. Može se pokazati da svaka rotacija može da se zapiše kao realna 3×3 matrica, kao i da važe relacije: $R^T R = I$ i $\det R = 1$. Na isti način kao \vec{r} se pri rotacijama transformišu svi vektori trodimenzionog prostora, na primer \vec{p} , \vec{L} : ova osobina je zapravo definicija pojma "vektor".

Jednačina (5.232) može lako da se uopšti za infinitezimalne rotacije za ugao ϵ oko ose \vec{n} , $\vec{\epsilon} = \epsilon \vec{n}$. Tada je $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{\epsilon} \times \vec{r}$, odnosno

$$x'_i = x_i + \epsilon \epsilon_{ijk} n_j x_k. \quad (5.233)$$

Oдавde možemo da očitamo generator rotacije oko ose \vec{n} u prirodnoj reprezentaciji $T_{\vec{n}}$,

$$(T_{\vec{n}})_{ik} = i \epsilon_{ijk} n_j. \quad (5.234)$$

Grupa rotacija je troparametarska Lie-jeva grupa a njeni parametri su uglovi rotacije.

Rotacije i translacije zajedno čine širu grupu transformacija trodimenzionog euklidskog prostora, tzv. GALILEI-JEVU GRUPU,

$$\vec{r}' = R\vec{r} + \vec{a}, \quad t' = t. \quad (5.235)$$

I elementi ove grupe mogu se prikazati kao matrice, u ovom slučaju formata 4×4 :

$$\begin{pmatrix} \vec{r}' \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R & \vec{a} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{r} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.236)$$

Wigner-Eckart-ova teorema

Veličine koje se mere u kvantnim sistemima izražavaju se preko skalarnih proizvoda (verovatnoće prelaza pri merenju), odnosno matičnih elemenata operatora (popravke energije, verovatnoće prelaza pri delovanju perturbacije). Značajno pojednostavljenje u računanju ovih izraza, u sistemima sa rotacionom simetrijom, daje teorija grupa preko Wigner-Eckart-ove teoreme. Teorema se odnosi na stanja koja su elementi standardnog bazisa tj. svojstvena stanja od J^2 i J_z , i ima primene u atomskoj fizici, gde po pravilu imamo svojstvena stanja angularnog momenta, i nuklearnoj fizici, jer su čestice svojstvena stanja izospina.

Ireducibilna reprezentacija grupe $SU(2)$ karakterisana vrednošću j Casimir-ovog operatora J^2 obično se zadaje standardnim bazisom $|j, m\rangle$ u kome je

$$J^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \quad (5.237)$$

$$J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle, \quad J_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle. \quad (5.238)$$

Videli smo da dejstvo grupe na stanja tj. vektore indukuje njeno pridruženo dejstvo na operatore, $M \rightarrow U(g)MU(g)^{-1}$, a generatori grupe u pridruženoj reprezentaciji su komutatori¹³,

$$e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon_i T_i} M e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_i T_i} = M + \frac{i}{\hbar} \epsilon_i [T_i, M]. \quad (5.239)$$

Ukoliko skup operatora $O_m^{(j)}$, $m = -j, -j+1, \dots, j$ zadovoljava relacije analogne sa drugom polovinom relacija koje definišu standardni bazis, (5.238),

$$[J_z, O_m^{(j)}] = \hbar m O_m^{(j)}, \quad [J_{\pm}, O_m^{(j)}] = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} O_{m \pm 1}^{(j)}, \quad (5.240)$$

kažemo da je $O^{(j)}$ ireducibilni tenzorski operator. Najvažniji ireducibilni tenzorski operatori su skalari,

$$[J_i, S] = 0, \quad (5.241)$$

i vektori, za koje važi

$$[J_i, V_k] = i \hbar \epsilon_{ikl} V_l. \quad (5.242)$$

Ako uvedemo sferne komponente vektora V_i kao

$$V_{-1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (V_x - iV_y), \quad V_0^{(1)} = V_z, \quad V_1^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (V_x + iV_y) \quad (5.243)$$

vidimo da se relacija (5.242) svodi na (5.240) za $j = 1$.

WIGNER-ECKART-OVA TEOREMA glasi: matični elementi ireducibilnog tenzorskog operatora $O^{(j)}$ u stanjima $|\tau, j, m\rangle$ (τ označava dodatne kvantne brojeve u odnosu na j i m) su

$$\langle \tau_2, j_2, m_2 | O_m^{(j)} | \tau_1, j_1, m_1 \rangle = C_{mm_1, j_2 m_2} \langle \tau_2, j_2 | O^{(j)} | \tau_1, j_1 \rangle, \quad (5.244)$$

$C_{mm_1, j_2 m_2}$ je Clebsch-Gordan-ov koeficijent uveden u (5.144), a *redukovani matični element* $\langle \tau_2, j_2 | O^{(j)} | \tau_1, j_1 \rangle$ ne zavisi od m, m_1 i m_2 .

Razmotrimo malo detaljnije najjednostavniji slučaj Wigner-Eckart-ove teoreme za skalarni operator S , za koji je $j = 0, m = 0, [\vec{J}, S] = 0$. Iz Wigner-Eckart-ove teoreme sledi da je

$$\langle \tau_2, j_2, m_2 | S | \tau_1, j_1, m_1 \rangle = \delta_{j_2 j_1} \delta_{m_2 m_1} \langle \tau_2, j_2 | S | \tau_1, j_1 \rangle. \quad (5.245)$$

Ovaj iskaz je u stvari zakon održanja ugaonog momenta, a može lako da se dokaže i eksplicitno. Iz $J^2 S = S J^2$ sledi da je

$$j_2(j_2 + 1) \langle \tau_2, j_2, m_2 | S | \tau_1, j_1, m_1 \rangle = j_1(j_1 + 1) \langle \tau_2, j_2, m_2 | S | \tau_1, j_1, m_1 \rangle, \quad (5.246)$$

odnosno da je $j_2 = j_1$; iz relacije $J_z S = S J_z$ analogno sledi $m_2 = m_1$. Konačno, koristeći da je $J_+ S = S J_+$ sličnim razmatranjem može da se vidi da je

$$\langle \tau_2, j, m | S | \tau_1, j, m \rangle = \langle \tau_2, j_2, m_2 - 1 | S | \tau_1, j_2, m_2 - 1 \rangle, \quad (5.247)$$

odnosno da redukovani matični element ne zavisi od $m_2 = m_1$.

¹³ili (-komutatori), ako pridruženu reprezentaciju definišemo kao $M \rightarrow U(g)^{-1} M U(g)$.

5.11 Zadaci

5.1 Tenzor jačine elektromagnetnog polja definisan je kao

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial x^\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu}.$$

Pokazati da je forma Maxwell-ovih jednačina (5.1) ekvivalentna sa Maxwell-ovim jednačinama sa izvorima (1.21) i (1.24).

5.2 Pokazati da 4×4 matrice oblika kao u jednačini (5.236) čine grupu i naći zakon množenja.

5.3 Ako je potencijalna energija u jednoj dimenziji parna funkcija, svojstvene funkcije vezanih stanja su ili parne ili neparne. Pokazati.

5.4 Pokazati da u impulsnoj reprezentaciji parnost deluje kao

$$\Pi \tilde{\psi}(p) = \tilde{\psi}(-p).$$

5.5 Pokazati da operator parnosti Π komutira sa momentom impulsa \vec{L} , spinom \vec{s} i ukupnim momentom impulsa \vec{J} .

5.6 Odrediti parnost sfernog harmonika Y_l^m . (Uputstvo: najpre odrediti kako se pri operaciji inverzije prostora $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ transformišu sferne koordinate r, θ, φ .)

5.7 Naći kako operator parnosti Π deluje na kreacioni operator a^\dagger harmonijskog oscilator. Šta se na osnovu toga može reći o parnosti svojstvenih stanja harmonijskog oscilatora $|n\rangle$?

5.8 Razmotriti dve identične čestice u sistemu njihovog centra masa. Kako deluje parnost u ovom sistemu?

5.9 Pokazati da se mogu odrediti parametri α i β tako da

$$U^{-1}(\alpha, \beta) = e^{iM}, \quad M = \alpha^2 x^2 + \beta^2 p^2,$$

bude operator koji na operatore koordinate i impulsa deluje na isti način kao i parnost.

5.10 Pokazati da je hamiltonijan izolovanog sistema n interagujućih čestica

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_{i \neq k} V_{ik}(|\vec{r}_i - \vec{r}_k|)$$

invarijantan na translacije, što znači da se ukupni impuls ovog sistema održava.

5.11 Ako je $U(\theta) = \exp(-i\theta L_y/\hbar)$, odrediti

a) $U_x U^\dagger$,

b) $U p_z U^\dagger$,

c) $U \left(\frac{p^2}{2m} + V(r) \right) U^\dagger$.

5.12 Pokazati da je $\vec{L}' = U^\dagger(\vec{a}) \vec{L} U(\vec{a}) = \vec{L} - \vec{a} \times \vec{p}$, gde je $U(\vec{a}) = \exp(i\vec{a} \cdot \vec{p}/\hbar)$. Potom izračunati komutator $[\vec{L}, \vec{L}']$.

5.13 Odrediti disperzije komponenti momenta impulsa, $\Delta L_i = \sqrt{\langle L_i^2 \rangle - \langle L_i \rangle^2}$, $i = 1, 2, 3$ u stanju $|l, m\rangle$.

5.14 Odrediti zbir kvadrata neodređenosti $(\Delta L_x)^2 + (\Delta L_y)^2 + (\Delta L_z)^2$ u stanju $|l, m\rangle$. U kom stanju je neodređenost minimalna? Po analogiji sa harmonijskim oscilatorom, ta stanja nazivaju se koherentna stanja za moment impulsa.

5.15 Kvadrat momenta impulsa čestice je $2\hbar^2$. Kako izgledaju stanja koja su svojstvena za operatore L^2 i L_x ? Napisati ova stanja preko sfernih harmonika u Descartes-ovim koordinatama.

5.16 Intenzitet momenta impulsa čestice je $l = \hbar$. Merenjem projekcije momenta impulsa u pravcu z -ose dobijen je rezultat \hbar . Kolika je verovatnoća da će se posle toga merenjem x komponente momenta impulsa dobiti rezultat \hbar , 0 odnosno $-\hbar$?

5.17 Algebarskim metodom rešili smo zajednički svojstveni problem operatora L^2 i L_z . Vektori $|l, m\rangle$ su svojstveni za oba operatora:

$$L^2|l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle, \quad L_z|l, m\rangle = \hbar m|l, m\rangle.$$

Operatori L_{\pm} su u okviru jednog multiplleta $l = \text{const}$ menjali kvantni broj m :

$$L_{\pm}|l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}|l, m \pm 1\rangle.$$

Da bismo prešli iz jednog multiplleta u drugi, razmotrimo operatore $x_{\pm} = x \pm iy$.

a) Pokazati da je

$$[L_z, x_{\pm}] = \pm \hbar x_{\pm}, \quad [L_{\pm}, x_{\pm}] = 0, \quad [L_{\pm}, x_{\mp}] = \pm 2\hbar z, \quad [L^2, x_{\pm}] = 2\hbar(\hbar x_{\pm} \pm x_{\pm} L_z \mp z L_{\pm}).$$

b) Razmotrimo vektor $x_+|l, l\rangle$. Pokazati da je

$$L^2 x_+|l, l\rangle = \hbar^2 (l+1)(l+2)x_+|l, l\rangle, \quad L_z x_+|l, l\rangle = \hbar(l+1)x_+|l, l\rangle.$$

Koji su kvantni brojevi svojstvenog vektora $x_+|l, l\rangle$?

c) Polazeći od stanja $|0, 0\rangle$, pomoću operatora L_{\pm} i x_{\pm} napisati (do na normalizaciju) stanje $|l, m\rangle$.

5.18 Pauli-jeve ili sigma matrice su (videti jednačinu (5.91)):

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Pokazati sledeće osobine ovih matrica:

a) $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = I.$

b) $\sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1 = i\sigma_3, \quad \sigma_2\sigma_3 = -\sigma_3\sigma_2 = i\sigma_1, \quad \sigma_3\sigma_1 = -\sigma_1\sigma_3 = i\sigma_2.$

c) $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}I + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k, \quad [\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k, \quad \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I.$

d) $\det \sigma_i = -1, \quad \text{tr} \sigma_i = 0.$

5.19 Rešiti svojstveni problem matrice $\sigma_{\vec{n}} = \sigma_i n_i$, gde je $n_i = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ ort određen polarnim uglom θ i azimutalnim uglom φ .

5.20 Operator koji reprezentuje rotaciju za ugao α oko ose \vec{n} u spinskom prostoru je

$$U = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \vec{s}},$$

gde je $\vec{s} = \hbar \vec{\sigma} / 2$.

a) Pokazati da je

$$U = \cos \frac{\alpha}{2} - i \vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin \frac{\alpha}{2}.$$

b) Ako je $\vec{\sigma} = \sigma_i \vec{e}_i$ izračunati $U \vec{\sigma} U^\dagger$.

c) Odrediti matricu rotacije za 2π i za 4π .

d) Ako je $\vec{n} = \vec{e}_z$ napisati kako izgledaju infinitezimalne rotacije.

5.21 Snop neutrona je u početnom trenutku bio u stanju

a) $\psi_a = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$

b) $\psi_b = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$

Snop se razlaže se na dva snopa, od kojih jedan prolazi kroz homogeno magnetno polje $\vec{B} = B \vec{e}_z$ a drugi ne. Posle vremena t snopovi se ponovo spajaju. Naći stanje snopa posle spajanja u zavisnosti od t .

5.22 Snop elektrona prolazi kroz Stern-Gerlach-ove analizatore uz pomoć kojih se određuje spin elektrona u snopu. Najpre snop prođe kroz Stern-Gerlach-ov analizator koji je usmeren duž z -ose i izdvojen je snop elektrona koji imaju svojstvenu vrednost $\hbar/2$. Odrediti moguće rezultate i verovatnoće njihovog pojavljivanja ako je snop usmeren na

a) Stern-Gerlach-ov analizator usmeren duž z -ose;

b) Stern-Gerlach-ov analizator usmeren duž x -ose;

c) Stern-Gerlach-ov analizator usmeren duž x -ose, a onda duž snopa koji ima svojstvenu vrednost $-\hbar/2$ nalazi se još jedan Stern-Gerlach-ov analizator usmeren duž z -ose.

5.23* Pokazati da se operatori spina- s mogu reprezentovati na sledeći način:

$$S_z = \hbar(s - a^\dagger a), \quad S_- = \hbar\sqrt{2s} a^\dagger \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2}, \quad S_+ = \hbar\sqrt{2s} \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} a,$$

gde su a^\dagger i a kreacioni i anihilacioni operatori koji zadovoljavaju komutacione relacije (3.149). (Ova reprezentacija se naziva Holstein-Primakoff-ova¹⁴.)

5.24* U Schwinger-ovoj reprezentaciji momenta impulsa imamo dva para operatora kreacije a_i^\dagger i anihilacije a_i , ($i = 1, 2$) koji zadovoljavaju komutacione relacije:

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = 0, \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0,$$

¹⁴T. Holstein and H. Primakoff, *Field Dependence of the Intrinsic Domain Magnetization of a Ferromagnet*, Phys. Rev. **58**, 1098 (1940).

pomoću kojih definišemo sledeće operatore

$$N_1 = a_1^\dagger a_1, \quad N_2 = a_2^\dagger a_2, \quad N = N_1 + N_2,$$

kao i

$$J_z = \frac{\hbar}{2} (a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2), \quad J_+ = \hbar a_1^\dagger a_2, \quad J_- = \hbar a_2^\dagger a_1.$$

- a) Pokazati da operatori J_i zadovoljavaju algebru ugaonog momenta kao i da važi

$$J^2 = \frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right) \hbar^2.$$

- b) Ako svojstvena stanja operatora N_i definišemo na uobičajeni način,

$$a_i^\dagger |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle, \quad a_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle$$

pokazati da se može izvršiti identifikacija stanja $|j, m\rangle$ i $|n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle$.

- c) Naći kako se stanje $|l, m\rangle$ može napisati preko delovanja kreacionih a_i^\dagger operatora na osnovno stanje $|0\rangle$.

5.25* U prethodnom zadatku uveli smo dva operatora kreacije i anihilacije pomoću kojih smo napisali operatore momenta impulsa J_a gde je ($a = x, y, z$). Razmotrimo dodatne bilinearne forme

$$K_+ = \hbar a_1^\dagger a_2^\dagger, \quad K_- = \hbar a_1 a_2, \quad K_z = \frac{\hbar}{2} (a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + 1),$$

$$I_+ = \hbar a_1^\dagger a_1^\dagger, \quad I_- = \hbar a_1 a_1, \quad I_z = \frac{\hbar}{2} (a_1^\dagger a_1 + a_1 a_1^\dagger),$$

$$L_+ = \hbar a_2^\dagger a_2^\dagger, \quad L_- = \hbar a_2 a_2, \quad L_z = \frac{\hbar}{2} (a_2^\dagger a_2 + a_2 a_2^\dagger).$$

- a) Odrediti kako operatori J_\pm, K_\pm, I_\pm i L_\pm deluju na stanje $|l, m\rangle$.

- b) Pokazati da je

$$[K_+, K_-] = -2\hbar K_z, \quad [K_z, K_\pm] = \pm\hbar K_\pm,$$

i analogno za operatore I_\pm i I_z odnosno L_\pm i L_z .

Operatori K_- i L_- međusobno komutiraju. Koherentno stanje za moment impulsa definiše se kao rešenje zajedničkog svojstvenog problema ova dva operatora

$$L_- |\beta, \gamma\rangle = \hbar \beta |\beta, \gamma\rangle, \quad K_- |\beta, \gamma\rangle = \hbar \gamma |\beta, \gamma\rangle.$$

Ovi operatori nisu hermitski pa su svojstvena stanja β i γ kompleksni brojevi, dok se konstanta \hbar pojavljuje iz dimenzionih razloga.

- c) Pokazati da je

$$|\beta, \gamma\rangle = \frac{1}{\text{ch}^{1/2} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \frac{\beta^m \gamma^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} |j, m\rangle,$$

gde je $\xi = (|\beta|^2 + |\gamma|^2)/|\beta|$.

- d) Izračunati očekivane vrednosti operatora J_x, J_y i J_z u stanju $|\beta, \gamma\rangle$.

5.26* Jedna od realizacija unitarne ireducibilne reprezentacije grupe SU(2) je u prostoru funkcija koji obrazuju polinomi z^k stepena $0 \leq k \leq 2j$ sa skalarnim proizvodom

$$\langle \psi | \chi \rangle = \frac{2j+1}{\pi} \int \frac{\psi(z)^* \chi(z)}{(1+|z|^2)^{2j+2}} d^2z$$

gde su $z = x + iy$ i $d^2z = dx dy$. Ako element grupe SU(2) parametrizujemo sa

$$g = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{pmatrix}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1,$$

reprezentacija ovog elementa u prostoru funkcija je

$$T^j(g) \varphi(z) = (\beta z + \alpha^*)^{2j} \varphi\left(\frac{\alpha z - \beta^*}{\beta z + \alpha^*}\right).$$

- a) Pokazati da su polinomi $\varphi_m(z) = C_{jm} z^{j+m}$, $m = -j, -j+1, \dots, j$, međusobno ortogonalni i naći koeficijente normiranja C_{jm} .
- b) Generatori rotacione grupe u ovoj reprezentaciji dati su sa

$$J_3 = z \frac{d}{dz} - j, \quad J_- = \frac{d}{dz}, \quad J_+ = -z^2 \frac{d}{dz} + 2jz.$$

Proveriti.

- c) Dokazati da je u odnosu na zadati skalarni proizvod J_3 hermitski operator kao i da je $J_-^\dagger = J_+$.

5.27 Pokazati da popunjene ljuske u atomima imaju ukupni orbitni ugaoni moment $\vec{L} = 0$ (a samim tim i $\vec{J} = 0$).

5.28 Naći Clebsch-Gordan-ove koeficijente $\langle l_1, m_1, l_2, m_2 | j, m_j, l_1, l_2 \rangle$ ako su $l_1 = 1$ i $l_2 = 1/2$.

5.29 Komponente Laplace-Runge-Lenz-ovog vektora su

$$A_i = \frac{1}{2m} \varepsilon_{ijk} (p_j L_k + L_k p_j) - Z e^2 \frac{x_i}{r}.$$

Pokazati da je

- a) $[A_i, H] = 0$;
- b) $\vec{L} \cdot \vec{A} = 0$.
- c) $A^2 = Z^2 e^4 + \frac{2H}{m} (L^2 + \hbar^2)$.

5.30 Grupa SO(1, 2) sadrži transformacije 2+1-dimenzionog prostora Minkowskog koje održavaju normu vektora $x_\mu x^\mu = (x_1)^2 + (x_2)^2 - (x_3)^2$. Osnovne komutacione relacije u ovoj grupi su

$$[M_1, M_2] = -iM_3, \quad [M_2, M_3] = iM_1, \quad [M_3, M_1] = iM_2.$$

- a) Pokazati da operatori

$$M_\pm = \frac{iM_1 \mp M_2}{\sqrt{2}}, \quad M^2 = (M_1)^2 + (M_2)^2 - (M_3)^2$$

zadovoljavaju komutacione relacije

$$[M^2, M_i] = 0, \quad [M_3, M_\pm] = \pm M_\pm, \quad [M_+, M_-] = M_3.$$

b) Pokazati da je $M_+^\dagger = -M_-$ i potom proveriti da je

$$M^2 = -M_+M_- - M_-M_+ - M_3^2.$$

c) Napisati M_+M_- i M_-M_+ preko M^2 i M_3 .

d) Po analogiji sa izvođenjem ireducibilnih reprezentacija za grupu rotacija SO(3) izvesti ireducibilne reprezentacije za SO(1,2).

e) Odrediti matrice generatora SO(1,2) u diskretnom bazu za koji je svojstvena vrednost Casimir-ovog operatora jednaka 0.

5.31 Komutacione relacije koje definišu SO(p, q) grupu su

$$[M_{\alpha\beta}, M_{\gamma\delta}] = i(\eta_{\alpha\gamma}M_{\beta\delta} - \eta_{\alpha\delta}M_{\beta\gamma} - \eta_{\beta\gamma}M_{\alpha\delta} + \eta_{\beta\delta}M_{\alpha\gamma}).$$

Ovde su sa slovima grčkog alfabeta $\alpha, \beta, \dots = 0, 1, 2, \dots, p+q-1$ označeni indeksi a $\eta_{\alpha\beta}$ je ravna metrika definisana sa $\eta_{\alpha\beta} = \text{diag}(\underbrace{-1, -1, \dots, -1}_p, \underbrace{1, 1, \dots, 1}_q)$. Posebno je značajan slučaj SO(1,3).

Ta grupa naziva se još i Lorentz-ova grupa i predstavlja grupu simetrija ravnog prostor-vremena koje ne menjaju koordinatni početak. Pokazati da su za Lorentz-ovu grupu Casimir-ovi operatori $C = M_{\alpha\beta}M^{\alpha\beta}$ i $\tilde{C} = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}M^{\alpha\beta}M^{\gamma\delta}$.

5.32 U sudaru protona i deuteronu stvaraju se pioni. Postoje dva kanala za ovaj proces,

$$p + d \rightarrow \pi^0 + \text{He}^3, \quad p + d \rightarrow \pi^+ + \text{H}^3.$$

Koristeći izospinski deo talasnih funkcija koje opisuju gornje čestice (a koje su date u tekstu) i Wigner-Eckart-ovu teoremu, odrediti verovatnoće da se proton i deuteron raspadnu na jedan odnosno na drugi način.

5.33 Naći relativne širine raspada delta-bariona na pione i nukleone $\Delta \rightarrow \pi + N$, u slučajevima kad postoje različiti kanali raspada. Šeme raspada su:

$$\begin{aligned} \Delta^{++} &\rightarrow \pi^+ + p, & \Delta^+ &\rightarrow \pi^0 + p, & \Delta^+ &\rightarrow \pi^+ + n, \\ \Delta^0 &\rightarrow \pi^- + p, & \Delta^0 &\rightarrow \pi^0 + n, & \Delta^- &\rightarrow \pi^- + n. \end{aligned}$$

VARIJACIJE: KOVARIJANTNOST

Kovarijantnost fizičkog zakona odnosno jednačine koja ga iskazuje znači da je ta jednačina "istog oblika" u različitim referentnim sistemima, tj. da postoji transformacija koja svako rešenje dobijeno u jednom sistemu reference jednoznačno preslikava u odgovarajuće rešenje u drugom sistemu reference. Grupa tih transformacija je *grupa simetrije fizičkog zakona*.

Da bismo dokazali kovarijantnost neke jednačine dovoljno je da nađemo reprezentaciju simetrije po kojoj se fizičke veličine koje u njoj figurišu transformišu. U prethodnoj glavi smo odredili unitarne operatore koji u kvantnoj mehanici reprezentuju parnost, translacije i rotacije: time smo zapravo dokazali da je Schrödinger-ova jednačina kovarijantna¹ na ove transformacije. Pokažimo ovo jednostavno tvrđenje i eksplicitno. Neka je $\hat{U}(g)$ kvantnomehantička reprezentacija grupe G , $g \in G$,

$$g: \vec{r}, t, \vec{p} \rightarrow \vec{r}', t, \vec{p}', \quad \hat{U}(g): \hat{U}^{-1} \hat{\tau} \hat{U} = \hat{\tau}', \quad \hat{U}^{-1} \hat{p} \hat{U} = \hat{p}'. \quad (6.1)$$

Schrödinger-ovu jednačinu u polaznom i transformisanom koordinatnom sistemu pišemo kao

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi\rangle, \quad i\hbar \frac{\partial |\Psi'\rangle}{\partial t} = \hat{H}' |\Psi'\rangle. \quad (6.2)$$

Poslednje dve jednačine su ekvivalentne za $|\psi'\rangle \equiv \hat{U}^{-1}(g)|\psi\rangle$ ², jer se druga jednačina dobija iz prve množenjem sa \hat{U}^{-1} (\hat{U} je unitaran, i prema tome nesingularan), pri čemu koristimo

$$\hat{U}^{-1} \hat{H} |\Psi\rangle = \hat{U}^{-1} \hat{H} \hat{U} \hat{U}^{-1} |\Psi\rangle = \hat{H}' |\Psi'\rangle, \quad (6.3)$$

a relacija $\hat{H}' = \hat{U}^{-1} \hat{H} \hat{U}$ sledi iz (6.1).

U narednim poglavljima analiziraćemo kovarijantnost Schrödinger-ove jednačine na dodatne simetrije: inverziju vremena, Galilei-jeve transformacije i gradijentne transformacije elektrodinamike.

¹Kovarijantna, ne invarijantna: invarijantnost je $\hat{H}' = \hat{U}^{-1} \hat{H} \hat{U} = \hat{H}$, i za navedene transformacije važi samo za Schrödinger-ovu jednačinu za slobodnu česticu.

²Ova relacija se razlikuje od (5.13) do na zamenu $\hat{U} \rightarrow \hat{U}^{-1}$. To je u principu tehnički detalj, posledica činjenice da u diskusiji kovarijantnosti iz jednog u drugi referentni sistem transformišemo rešenja, odnosno celu Schrödinger-ovu jednačinu, što je formalno različito.

6.1 Inverzija vremena i Galilei-jeve transformacije

Pre nego što pređemo na specijalne Galilei-jeve transformacije, odredićemo kako se u kvantnoj mehanici realizuju transformacije koje sadrže vreme. Prva je *translacija vremena*,

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \vec{r}, \quad t \rightarrow t' = t + b. \quad (6.4)$$

Ako zakon transformacije (5.20), po kome se talasna funkcija transformiše kao skalarno polje, uopštimo i na vremensku koordinatu,

$$\Psi'(\vec{r}', t') = \Psi(\vec{r}, t), \quad (6.5)$$

i vremensku translaciju označimo sa $\hat{U}(b) = e^{-i\hat{t}b}$, dobijamo

$$\hat{U}^{-1}(b)\Psi(\vec{r}, t) = \Psi'(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t - b) = e^{i\hat{H}b}\Psi(\vec{r}, t). \quad (6.6)$$

Prema tome, generator vremenske translacije \hat{t} proporcionalan je hamiltonijanu,

$$\hbar\hat{t} = \hat{H}. \quad (6.7)$$

Ovaj generator nije kinematička veličina već zavisi od konkretnog sistema: translacija u vremenu je *evolucija* sistema. Ako, sa druge strane, razvijemo desnu stranu jednačine (6.6) u red po b , dobijamo

$$\hat{t} = i \frac{\partial}{\partial t} \quad (6.8)$$

Jednakost izraza (6.7) i (6.8) na svim stanjima je zapravo Schrödinger-ova jednačina. Ovaj rezultat upućuje na analogiju vremenske i prostornih koordinata t i \vec{r} , odnosno E i \vec{p} , koja će se realizovati u relativističkoj kvantnoj mehanici kao Lorentz-ova kovarijantnost.

Vremenska inverzija T definiše se sa

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \vec{r}, \quad t \rightarrow t' = -t \quad (6.9)$$

i pri tome, $T^2 = 1$. Relativno jednostavno se vidi da odgovarajuća kvantnomehanička transformacija $\hat{\Theta}$ ne može da bude unitarni operator: ako bi bila unitarna i zadovoljavala

$$x'_i = \hat{\Theta}^{-1}x_i\hat{\Theta} = x_i, \quad p'_i = \hat{\Theta}^{-1}p_i\hat{\Theta} = -p_i \quad (6.10)$$

kao u klasičnoj mehanici, računajući kanonski komutator na dva načina dobili bismo kontradikciju:

$$[x'_i, p'_j] = \begin{cases} [\hat{\Theta}^{-1}x_i\hat{\Theta}, \hat{\Theta}^{-1}p_j\hat{\Theta}] = -i\hbar\delta_{ij} \\ \hat{\Theta}^{-1}[x_i, p_j]\hat{\Theta} = \hat{\Theta}^{-1}i\hbar\delta_{ij}\hat{\Theta} = i\hbar\delta_{ij}. \end{cases} \quad (6.11)$$

Ali ako je $\hat{\Theta}$ antiunitaran pa se i u poslednjem koraku kompleksno konjuguje, komutatori su kompatibilni. Zato se vremenska inverzija reprezentuje sa

$$\Psi'(\vec{r}', t') = \Psi^*(\vec{r}, t), \quad (6.12)$$

odnosno

$$\hat{\Theta}\Psi(\vec{r}, t) = \Psi'(\vec{r}, t) = \Psi^*(\vec{r}, -t) \quad (6.13)$$

pošto je $\hat{\Theta} = \hat{\Theta}^{-1}$. Lako se proverava da je Schrödinger-ova jednačina kovarijantna na ovu transformaciju, odnosno ekvivalentna sa transformisanom jednačinom

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'(\vec{r}', t')}{\partial t'} = \hat{H}'\Psi(\vec{r}', t'), \quad (6.14)$$

jer imamo

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'(\vec{r}', t')}{\partial t'} = -i\hbar \frac{\partial \Psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}^* \Psi^*(\vec{r}, t) = \hat{H}' \Psi'(\vec{r}', t') \quad (6.15)$$

kada je \hat{H} hermitski operator odnosno realna funkcija, $\hat{H}^* = \hat{H}' = \hat{H}$. To je slučaj u odsustvu magnetnog polja, $\vec{A} = 0$. Ranije smo komentarisali da se disipacija energije može formalno uključiti u Schrödinger-ovu jednačinu uvođenjem kompleksnog potencijala: jasno je da u tom slučaju inverzija vremena nije, i ne treba da bude, simetrija jednačine.

U Galilei-jevu grupu osim rotacija i translacija spadaju *specijalne Galilei-jeve transformacije* ili, kako ih zovemo u relativističkom slučaju, *bustovi*. Bustovi opisuju transformaciju iz jednog inercijalnog sistema u drugi inercijalni sistem koji se kreće konstantnom brzinom \vec{v} . Ovdje ćemo se zadržati na bustovima u jednoj dimenziji: uopštenje na tri dimenzije je pravolinijsko. Specijalne Galilei-jeve transformacije su definisane sa

$$x \rightarrow x' = x - vt, \quad t \rightarrow t' = t, \quad p \rightarrow p' = p - mv. \quad (6.16)$$

Ispostavlja se da, da bi se ova transformacija realizovala, zakon transformacije talasne funkcije mora da se uopšti: pretpostavićemo da on sadrži dodatni fazni faktor odnosno da je reprezentacija projektivna³,

$$\Psi'(x', t') = e^{if(x,t)} \Psi(x, t). \quad (6.17)$$

Kovarijantnost znači da, ako je $\Psi(x, t)$ rešenje jednačine

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t), \quad (6.18)$$

$\Psi'(x', t')$ treba da bude rešenje jednačine

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'(x', t')}{\partial t'} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi'(x', t')}{\partial x'^2} + V'(x') \Psi'(x', t'). \quad (6.19)$$

Vidi se da će principu transformacija zavisi od oblika potencijala V , odnosno od hamiltonijana \hat{H} : to nije neobično pošto se radi o transformaciji koja zavisi od vremena. Problem nije jednostavniji ni ako tražimo operatorski ekvivalent (6.16), jer zbog eksplicitne zavisnosti busta $\hat{U}(v)$ od vremena, odgovarajuće jednačine treba da se rešavaju u Heisenberg-ovoj slici:

$$\hat{U}^{-1}(v) \hat{x}_H \hat{U}(v) = \hat{x}_H - vt, \quad \hat{U}^{-1}(v) \hat{p}_H \hat{U}(v) = \hat{p}_H - mv, \quad (6.20)$$

pa opet imamo zavisnost od hamiltonijana. Zato ćemo da se zadržimo samo na (najjednostavnijem) slučaju slobodne čestice, $V = 0$. Iz (6.16) imamo

$$\frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\partial}{\partial x}. \quad (6.21)$$

Zamenjujući ove izraze i pretpostavljeni oblik transformacije (6.17) u Schrödinger-ovu jednačinu (6.19), dobijamo

$$i \frac{\partial f}{\partial t} \Psi + i v \frac{\partial f}{\partial x} \Psi + v \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i\hbar}{2m} \left(-\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)^2 \Psi + 2i \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + i \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Psi \right). \quad (6.22)$$

Pošto je $\Psi(x, t)$ proizvoljna funkcija, poslednja jednakost daje uslove na fazni faktor $f(x, t)$:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{mv}{\hbar}, \quad \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{mv^2}{2\hbar}. \quad (6.23)$$

³J. Lévy-Leblond, Commun. Math. Phys. **6** (1967) 286

Rešenje ovih uslova je

$$f(x, t) = -\frac{mv}{\hbar}x + \frac{mv^2}{2\hbar}t, \quad (6.24)$$

što znači da je Galilei-jeva transformacija talasne funkcije slobodne čestice data sa

$$\Psi'(x', t') = e^{-\frac{i}{\hbar}(mvx - \frac{1}{2}mv^2t)} \Psi(x, t), \quad (6.25)$$

odnosno

$$\Psi'(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(mvx + \frac{1}{2}mv^2t)} \Psi(x + vt, t). \quad (6.26)$$

Možemo da proverimo da je zakon množenja odnosno kompozicije bustova dobar. Iz

$$\Psi'(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(mv_1x + \frac{1}{2}mv_1^2t)} \Psi(x + v_1t, t),$$

$$\Psi''(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(mv_2x + \frac{1}{2}mv_2^2t)} \Psi'(x + v_2t, t),$$

sledi

$$\Psi''(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(m(v_1+v_2)x + \frac{1}{2}m(v_1+v_2)^2t)} \Psi(x + (v_1 + v_2)t, t). \quad (6.27)$$

6.2 Fazna transformacija

Na kraju, dokažimo kovarijantnost Schrödinger-ove jednačine pri gradijentnim transformacijama elektromagnetnih potencijala. Mi smo zapravo ovu osobinu već koristili pri rešavanju kretanja elektrona u Coulomb-ovom i magnetnim poljima, jer smo u svakom od tih problema izabrali određeni gradijentni uslov (gejdž) za potencijale pretpostavljajući da je to na neki način "u redu": sada ćemo ovu osobinu i dokazati.

Električno i magnetno polje mogu se preko elektromagnetnih potencijala izraziti kao

$$\vec{E} = -\text{grad } \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \text{rot } \vec{A}. \quad (6.28)$$

Međutim, pošto su polja izvodi potencijala, postoji nejednoznačnost u izboru Φ i \vec{A} . Pri transformacijama

$$\Phi \rightarrow \Phi' = \Phi + \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} - c \text{ grad } \chi \quad (6.29)$$

polja \vec{E} i \vec{B} ostaju ista za proizvoljnu funkciju $\chi(\vec{r}, t)$: $\vec{E}' = \vec{E}$, $\vec{B}' = \vec{B}$. Ove transformacije zovu se *gradijentne* ili *gejdž transformacije*. Klasične jednačine kretanja (kako za elektromagnetno polje tako i za naelektrisanu česticu) se ne menjaju pri (6.29), pa gradijentne transformacije predstavljaju simetriju klasične teorije. Vidi se dalje da je simetrija *unutrašnja* jer se pri njoj transformišu samo polja, ne prostor-vreme. Međutim, za razliku od izospina, funkcija $\chi(\vec{r}, t)$ koja definiše (6.29) zavisi od \vec{r} i t tj. različita je u svakoj tački prostor-vremena, pa kažemo da je simetrija *lokalna*. Simetrije kao što je izospin, čiji su parametri konstante a ne funkcije, nazivaju se *globalne* simetrije.

Znači, hoćemo da proverimo da li je Schrödinger-ova jednačina kovarijantna na gradijentne transformacije, odnosno, da li u kvantnoj mehanici možemo slobodno da fiksiramo gejdž uslov kao u klasičnoj. Drugim rečima, da li se za transformaciju (6.29) može definisati preslikavanje $\Psi \rightarrow \Psi'$, takvo da su Schrödinger-ove jednačine

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \Psi + e\Phi \Psi, \quad (6.30)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A}' \right)^2 \Psi' + e\Phi' \Psi' \quad (6.31)$$

ekvivalentne? Pretpostavićemo da je to preslikavanje oblika

$$\Psi'(\vec{r}, t) = U^{-1}(\chi) \Psi(\vec{r}, t) = e^{if(\vec{r}, t)} \Psi(\vec{r}, t). \quad (6.32)$$

Iz

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi' = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^{-1} \Psi = U^{-1} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial f}{\partial t} \right) \Psi, \quad (6.33)$$

$$-i\hbar \nabla \Psi' = -i\hbar (\nabla U^{-1} \Psi) = U^{-1} (-i\hbar \nabla + \hbar \nabla f) \Psi \quad (6.34)$$

sledi da se generalisani impulsi koje smo ranije uveli, $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi$, $-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A}$, transformišu kovarijantno,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi' = U^{-1} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right) U \quad (6.35)$$

$$-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A}' = U^{-1} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right) U \quad (6.36)$$

za izbor faze

$$f(\vec{r}, t) = -\frac{e}{\hbar} \chi(\vec{r}, t). \quad (6.37)$$

Zato se oni zovu *kovarijantni izvodi*. Pošto je izražena preko kovarijantnih izvoda, Schrödinger-ova jednačina (6.30) kovarijantna je na transformacije (6.29) dopunjene *faznom transformacijom talasne funkcije*

$$\Psi'(\vec{r}, t) = e^{-i\frac{e}{\hbar} \chi(\vec{r}, t)} \Psi(\vec{r}, t). \quad (6.38)$$

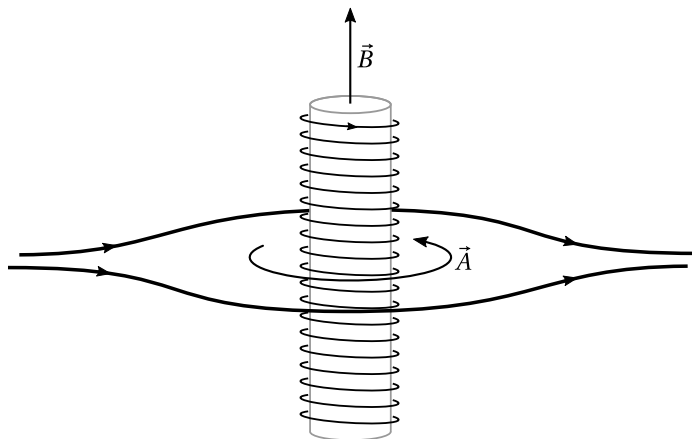
Lako se može proveriti da se pri ovoj transformaciji ni gustina verovatnoće ni fluks (4.90) ne menjaju. Pošto su u prostoru talasnih funkcija elementi grupe gradijentnih transformacija kompleksne funkcije modula jedan, kažemo da je grupa simetrije *lokalna* $U(1)$ grupa.

6.3 Efekat Aharonova i Bohm-a

U Schrödinger-ovoj jednačini koja opisuje kretanje čestice u elektromagnetnom polju eksplicitno figurišu elektromagnetni potencijali a ne električno i magnetno polje kao u klasičnim jednačinama. U klasičnoj elektrodinamici potencijali se nameću kao prirodne varijable kroz princip najmanjeg dejstva; osim toga, pri Lorentz-ovim transformacijama potencijali se transformišu kao komponente vektora, jednostavnije nego polja koja su komponente antisimetričnog tenzora drugog reda. Ipak ono što se klasično meri su jačine polja. Pitanje je: da li se potencijali mogu videti pomoću kvantnog efekta, tj. da li imaju direktne opservabilne posledice? Potvrđan odgovor dali su Aharonov i Bohm 1959, a eksperiment koji je proverio efekat koji su oni predvideli je izvršio Chambers 1960. godine⁴.

U postavci koju su predložili Aharonov i Bohm analizira se rasejanje snopa elektrona u spoljašnjosti beskonačno dugačkog solenoida poluprečnika a ; snop se kreće normalno na solenoid. Kroz solenoid protiče struja: magnetno polje koje ona indukuje unutar solenoida je konstantno, a izvan njega je nula. Zbog toga je Lorentz-ova sila van solenoida nula pa klasično, magnetno polje ne utiče na kretanje elektrona. Razmotrimo ovaj problem u kvantnoj mehanici.

⁴Y. Aharonov, D. Bohm, Phys. Rev. **115** (1959) 485, R. G. Chambers, Phys. Rev. Lett. **5** (1960) 3.



Slika 6.1: Magnetni Aharonov-Bohm-ov efekat.

Ako osu solenoida usmerimo duž z -ose, vektorski potencijal koji opisuje magnetno polje dat je, u cilindričnim koordinatama (ρ, φ, z) , sa

$$\vec{A}(\rho) = \begin{cases} \frac{B\rho}{2} \vec{e}_\varphi, & \rho < a \\ \frac{Ba^2}{2\rho} \vec{e}_\varphi, & \rho > a. \end{cases} \quad (6.39)$$

U svom radu Aharonov i Bohm se razmatrali kretanje slobodnih elektrona. Taj problem podrazumeva identifikaciju upadnog i izlaznih stanja elektrona pri rasejanju: pošto smo teoriju rasejanja ostavili za poslednju glavu, modifikovaćemo problem kao u udžbeniku Sakurai-ja⁵ i odrediti svojstvene energije vezanih stanja, a na samo rasejanje ćemo se vratiti na kraju poglavlja. Pretpostavimo da je kretanje dodatno lokalizovano potencijalom

$$U(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho \in (a, b) \\ \infty, & \rho \notin (a, b) \end{cases} \quad (6.40)$$

tj. da se elektron nalazi u cilindričnoj šupljini $\rho \in (a, b)$. Potencijal U na talasnu funkciju $\psi(\rho, \varphi, z)$ nameće granične uslove

$$\psi(\rho, \varphi, z) = 0, \quad \rho \notin (a, b), \quad \psi(a, \varphi, z) = \psi(b, \varphi, z) = 0 \quad (6.41)$$

pri kojima treba da rešimo Schrödinger-ovu jednačinu

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \frac{a^2 B}{2\rho} \vec{e}_\varphi \right)^2 \psi = E\psi. \quad (6.42)$$

U cilindričnim koordinatama operator nabra dat je izrazom

$$\nabla = \vec{e}_\rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z}, \quad (6.43)$$

pa je kovarijantni izvod u šupljini $\rho \in (a, b)$ jednak

$$-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \vec{A} = -i\hbar \left(\vec{e}_\rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{ea^2 B}{2\hbar c} \right) + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (6.44)$$

⁵J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Revised Edition), Addison Wesley, 1993.

Zadati potencijal zapravo samo menja \vec{e}_φ -komponentu gradijenta i to za konstantu, pa Schrödinger-ova jednačina glasi

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{e a^2 B}{2 \hbar c} \right)^2 \psi + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi. \quad (6.45)$$

Pošto se u jednačini jedino promenljiva ρ pojavljuje eksplicitno, njena partikularna rešenja razdvajaju promenljive,

$$\psi(\rho, \varphi, z) = R(\rho)F(\varphi)Z(z) = R(\rho) e^{im\varphi} e^{ik_z z}, \quad (6.46)$$

m je ceo broj zbog neprekidnosti talasne funkcije u $\varphi = 0$ tj. $\varphi = 2\pi$. Jednačina za $R(\rho)$ je

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{1}{\rho^2} \left(m - \frac{e a^2 B}{2 \hbar c} \right)^2 R + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - k_z^2 \right) R = 0, \quad (6.47)$$

odnosno

$$\rho^2 R'' + \rho R' + (k^2 \rho^2 - \nu^2) R = 0, \quad (6.48)$$

gde smo označili

$$\nu = m - \frac{e a^2 B}{2 \hbar c}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} - k_z^2. \quad (6.49)$$

Uvođenjem promenljive $k\rho$ ova jednačina se svodi na Bessel-ovu jednačinu, koja za svako ν ima dva linearno nezavisna rešenja,

$$R(\rho) = \alpha J_\nu(k\rho) + \beta Y_\nu(k\rho). \quad (6.50)$$

Treba još da nametnemo granični uslov $R(a) = 0$, $R(b) = 0$. Bessel-ove funkcije u oblasti $\rho \in (0, \infty)$ imaju beskonačno mnogo nula (asimptotski su proporcionalne sinusu ili kosinusu): neke od njihovih osobina date su u dodatku sledeće glave. Kada bismo u rešenju koje posmatramo imali samo jednu od dve linearno nezavisne Bessel-ove funkcije, na primer J_ν , granični uslov bi imao rešenje jedino u slučaju da je odnos b/a jednak odnosu neke dve nule funkcije J_ν . Ovako, on daje kvantovanje konstante k . Iz

$$\alpha J_\nu(ka) = -\beta Y_\nu(ka), \quad \alpha J_\nu(kb) = -\beta Y_\nu(kb) \quad (6.51)$$

dobijamo jednačinu za k ,

$$J_\nu(ka) Y_\nu(kb) - J_\nu(kb) Y_\nu(ka) = 0. \quad (6.52)$$

Funkcija $J_\nu(\xi) Y_\nu(\lambda\xi) - J_\nu(\lambda\xi) Y_\nu(\xi)$ ima beskonačno mnogo realnih prostih nula za svako realno ν i svako pozitivno $\lambda = b/a$ ⁶.

Ukupno, svojstvene funkcije elektrona u potencijalu (6.40) su

$$\psi_{\nu k_z} = \begin{cases} (\alpha J_\nu(k\rho) + \beta Y_\nu(k\rho)) e^{im\varphi} e^{ik_z z}, & \rho \in (a, b) \\ 0, & \rho \notin (a, b) \end{cases} \quad (6.53)$$

i imaju energiju

$$E_{\nu k_z} = \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 + k_z^2). \quad (6.54)$$

⁶Jedna od klasičnih referenci za specijalne funkcije je M. Abramowitz, I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions: with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Dover Books on Mathematics, 1965.

k_z je proizvoljan realan broj a k je diskretno i zavisi od ν , odnosno od B i m . Prema tome, spektar energije elektrona zavisi od vrednosti magnetnog polja, iako je ono jednako nuli u celoj oblasti u kojoj se elektron kreće! Skup svojstvenih funkcija ne zavisi od B samo u slučaju da je

$$\frac{eBa^2}{2\hbar c} = \frac{e}{2\pi\hbar c} \pi a^2 B = n \in \mathbb{Z}, \quad (6.55)$$

tj. ako je fluks magnetnog polja kroz solenoid kvantovan. Tada Bessel-ove funkcije J_ν i Y_ν imaju celobrojni indeks $\nu = m - n$: pošto m prolazi ceo skup celih brojeva, za fiksirano n i ν "prolazićeo \mathbb{Z} .

Da dodatno prodiskutujemo (u skladu sa originalnim radom) u kojim situacijama može da postoji efekat Aharonova i Bohm-a i zašto se kaže da je on *topološki*. Razmatramo polaznu situaciju rasejanja, u kojoj upadni snop elektrona nailazi na solenoid (ulazi u nenulti potencijal) i razdvaja se na dva snopa; snopovi zatim na izlazu interferiraju. Pretpostavimo da je polje stationarno i opisano vektorskim potencijalom $\vec{A}(\vec{r})$, $\Phi(\vec{r}) = 0$, i da je rešenje Schrödinger-ove jednačine u odsustvu magnetnog polja sa zadatim graničnim uslovima $\psi_0(\vec{r})$. Tada se jedno *formalno* rešenje Schrödinger-ove jednačine u potencijalu $\vec{A}(\vec{r})$ može dobiti kao

$$\psi(\vec{r}) = e^{-\frac{iS(\vec{r})}{\hbar}} \psi_0(\vec{r}), \quad (6.56)$$

gde je faza $S(\vec{r})$

$$S(\vec{r}) = -\frac{e}{c} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{A} \cdot d\vec{r} \quad (6.57)$$

integral po proizvoljnoj krivoj između fiksirane tačke \vec{r}_0 i tačke određene vektorom položaja \vec{r} . Poslednji iskaz je lako proveriti: koristeći (6.34) dobijamo da faza treba da zadovoljava

$$\nabla S = -\frac{e}{c} \vec{A}, \quad (6.58)$$

što je za (6.57) ispunjeno.

Ovo rešenje možemo da primenimo na problem rasejanja elektrona prikazan na SLICI. Upadni snop je linearna kombinacija snopova 1 i 2 koji solenoid obilaze odozgo i odozdo, $\psi = \psi_1 + \psi_2$, pri čemu je

$$\psi_1 = e^{-\frac{iS_1}{\hbar}} \psi_0, \quad \psi_2 = e^{-\frac{iS_2}{\hbar}} \psi_0, \quad (6.59)$$

a S_1 i S_2 su faze koji snopovi dobiju integracijom po gornjoj odnosno donjoj krivoj. Fazna razlika $\Delta S = S_1 - S_2$ (u eksperimentu se meri interferencijom dva snopa) proporcionalna je fluksu magnetnog polja,

$$\Delta S = -\frac{e}{c} \oint \vec{A} \cdot d\vec{r} = -\frac{e}{c} \iint \vec{B} \cdot d\vec{S} = -\frac{e}{c} \pi a^2 B. \quad (6.60)$$

Poslednja jednakost sledi iz Stokes-ove teoreme. Treba pri tome imati u vidu da Stokes-ova teorema važi samo kada je prostor prosto povezan, tj. ako se u njemu sve zatvorene krive mogu kontrahovati u tačku. Zato kriva integracije u poslednjoj formuli ne može da obuhvata solenoid spolja (na njoj je magnetno polje nula) jer je prostor bez cilindra $\rho \leq a$ višestruko povezan, već se integracija vrši po krugu na solenoidu ili infinitezimalno blizu iznutra.

Pošto zavisi od topoloških osobina prostora tj. od njegove povezanosti, Aharonov-Bohm-ov efekat je topološki, i javlja se samo kada je prostor kao u gornjem primeru višestruko povezan. Iz dobijenih formula vidimo da efekat zapravo ne meri direktno vektorski potencijal nego fluks magnetnog polja, koji je gradijentno invarijantna veličina. Pri tome talasna funkcija "vidi" polje u celom prostoru, pa pomoću nje mogu da se izmere globalne invarijante polja odnosno prostora.

6.4 Zadaci

6.1 Pokazati da iz (6.25) sledi (6.26).

6.2 Razmotrimo Galilei-jevu transformaciju za jednodimenzionu slobodnu česticu.

a) Pokazati da se ova transformacija može reprezentovati operatorom

$$U(\alpha, \beta) = \exp(i(\alpha x + \beta p)),$$

gde su α i β parametri koji zavise od m , v i t . Ovde se može koristiti

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]},$$

koja važi kada je $[A, B] = \text{const}$.

b) Uočiti da se data transformacija može napisati u obliku

$$U(v) = e^{-\frac{i}{\hbar} B v},$$

gde je v brzina (parametar busta) dok je B generator busta. Odrediti komutatore generatora busta B sa koordinatom x i impulsom p .

6.3 Odrediti operator specijalne Galilei-jeve transformacije u Heisenberg-ovoj slici,

$$U_H(v) = e^{-\frac{i}{\hbar} v B_H}$$

tj. rešiti jednačine

$$U_H^{-1} x_H U_H = x_H - vt, \quad U_H^{-1} p_H U_H = p_H - mv$$

uzimajući da u fiksiranom trenutku vremena važi $[x_H, p_H] = i\hbar$. Proveriti potom kako operator busta deluje na talasnu funkciju $\Psi(x, t)$.

6.4 Naći komutacione relacije između komponenti kinematičkog impulsa

$$\Pi_i = p_i - \frac{e}{c} A_i.$$

i pokazati da je taj komutator srazmeran sa magnetnim poljem $B_k = \varepsilon_{klm}(\partial A_m / \partial x_l)$.

6.5 Pokazati da su gustina verovatnoće ρ i fluks verovatnoće \vec{j} za česticu u spoljašnjem elektromagnetnom polju invarijantni na gejdž transformacije.

FINALE: Približne metode

Samo za mali broj jednostavnijih fizičkih sistema Schrödinger-ova jednačina može se rešiti egzaktno. Da bi se opisalo ponašanje sistema koji imaju više čestica (višeelektronski atomi, molekuli i kristali) ili komplikovanje međusobne interakcije, razvijaju se približne metode. Ta situacija nije specifična za kvantnu mehaniku: i u klasičnoj mehanici intuicija se gradi na poznavanju nekoliko osnovnih fizičkih sistema, a kretanje komplikovanijih sistema rešava se približno. Naravno, u onoj meri u kojoj su klasični i kvantni opis različiti, različite su i aproksimacije. Osim približnih analitičkih metoda veoma su važne numeričke metode, i postoji čitav niz specifičnih koncepata i algoritama razvijenih za primenu u fizici čvrstog stanja, fizici molekula itd: o njima ovde neće biti reči, zadržaćemo se na metodama koje se formulišu analitički.

Približni metod zavisi od konkretnog problema koji se rešava. Velika grupa problema u primenama kvantne mehanike vezana je za određivanje energija i identifikaciju spektara, kao i za nalaženje stacionarnih stanja: takvi problemi rešavaju se stacionarnom teorijom perturbacija, varijacionim računom i sličnim metodama. Druga grupa vezana je za dinamiku, odnosno za određivanje verovatnoća prelaza, poluvremena raspada, efikasnih preseka itd: te probleme rešavamo vremenski zavisnom perturbacijom, teorijom rasejanja i slično. U ovoj glavi izvešćemo nabrojane metode u njihovoj osnovnoj varijanti i primeniti na neke važne sisteme; videćemo sem toga kako se u nekim slučajevima sam metod modifikuje da bi se adekvatno opisao traženi fenomen ili efekat.

7.1 Stacionarna teorija perturbacija

Veoma čest fizički problem je da se odrede energetske nivoe i svojstvene funkcije fizičkog sistema kada se sistem malo promeni, *perturbuje*. Tipičan primer je: kako se menja spektar energije atoma ili molekula kada se uključi slabo spoljašnje električno ili magnetno polje? Osnovna (fizička, matematička) ideja teorije perturbacija je da sistem i "posle uključenja" perturbacije zadržava svoje osnovne karakteristike kao što su na primer postojanje vezanih stanja, diskretnost spektra itd, a da ih perturbacija (samo) malo menja. Zato ima smisla da se perturbovani sistem opiše terminima koji se odnose na osnovni, neperturovani sistem. "Malo" fizički znači da su tipične promene energije koje perturbacija unosi mnogo manje od karakterističnih energija u polaznom sistemu, npr. od razlika energetskih nivoa. Iz gornjeg primera atoma u električnom polju jasno je da dodatna spoljašnja interakcija u principu ne mora da bude per-

turbacija: u jakom električnom polju atom se jonizuje, pa opis elektrona i jezgra kao vezanog stanja postaje neadekvatan, a sa njim i primena teorije perturbacija.

Pretpostavimo da je hamiltonijan sistema oblika

$$H = H_0 + U, \quad (7.1)$$

gde je H_0 neperturbovani hamiltonijan čije osobine, spektar i svojstvene funkcije, znamo. U je perturbacija, odnosno potencijalna energija koja je opisuje; uzimamo ovde da ona ne zavisi od vremena. Da bismo istakli činjenicu da je perturbacija mala, pišaćemo u nastavku

$$H = H_0 + \lambda V \quad (7.2)$$

tj. $U = \lambda V$, pretpostavljajući da je $\lambda \ll 1$. Uvođenje malog parametra λ je stvar "knjigovodstva", način da lakše vodimo računa o redovima veličina; fizički parametar po kome se razvija je odnos energija $|U/H_0|$. Pretpostavljamo, dakle, da je sistem dominantno opisan hamiltonijanom H_0 , a korekcije zbog prisustva perturbacije su prvog i višeg reda po λ . To znači da, ako sa E_n i $|\psi_n\rangle$ označimo svojstvene energije i svojstvene funkcije od H ,

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \quad (7.3)$$

možemo da pišemo

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots, \\ |\psi_n\rangle &= |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \end{aligned} \quad (7.4)$$

Pri tome ćemo svojstveni bazis od H_0 označiti sa $\{|n\rangle\}$:

$$H_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n\rangle, \quad (7.5)$$

i pretpostaviti da je diskretan i, za početak, nedegenerisan. Naravno, $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$.

Koristeći (7.4), svojstvenu jednačinu (7.3) možemo da prepíšemo kao

$$(H_0 + \lambda V) (|n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots) (|n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots). \quad (7.6)$$

Ako u ovoj jednačini izjednačimo članove uz iste stepene od λ , dobijamo

$$H_0 |n\rangle = E_n^{(0)} |n\rangle \quad (7.7)$$

$$H_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + V |n\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |n\rangle \quad (7.8)$$

$$H_0 |\psi_n^{(2)}\rangle + V |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |n\rangle \quad (7.9)$$

...

Prva od jednačina ovog sistema je, naravno, identična sa (7.5). Sistem se rešava iterativno: kada se reši jednačina (7.7), dobijene vrednosti $E_n^{(0)}$ i $|n\rangle$ se zamene u (7.8) koja se onda rešava po *prvim popravkama* energije i svojstvenih stanja, $E_n^{(1)}$ i $|\psi_n^{(1)}\rangle$. Dalje, iz osnovnog stanja i prvih popravki rešavanjem jednačine (7.9) dobijamo *druge popravke* energije i stanja i tako redom dalje, do potrebne tačnosti.

Da bismo rešili jednačine (7.8) i (7.9) treba da ih napišemo u nekom određenom bazisu, a bazis prirodno definisan problemom je $\{|n\rangle\}$. Označimo

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |k\rangle, \quad |\psi_n^{(2)}\rangle = \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |k\rangle, \quad (7.10)$$

itd. Pretpostavljamo da su popravke ortogonalne na početno stanje $|n\rangle$: ispostavlja se, videćemo, da popravka duž $|n\rangle$ i ne može da se odredi. U bazu $\{|n\rangle\}$, jednačina (7.8) glasi

$$H_0 \sum c_{nk}^{(1)} |k\rangle + V|n\rangle = E_n^{(0)} \sum c_{nk}^{(1)} |k\rangle + E_n^{(1)} |n\rangle, \quad (7.11)$$

odnosno

$$\sum (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) c_{nk}^{(1)} |k\rangle + V|n\rangle = E_n^{(1)} |n\rangle. \quad (7.12)$$

Projekcija ove jednačine na pravac $|n\rangle$ daje prvu popravku energije: množenjem sleva sa $\langle n|$ dobijamo

$$E_n^{(1)} = \langle n|V|n\rangle = V_{nn}. \quad (7.13)$$

Ostale projekcije jednačine (7.12) daju popravku talasne funkcije, odnosno koeficijente $c_{nm}^{(1)}$: množenjem sa $\langle m| \neq \langle n|$ dobija se

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) c_{nm}^{(1)} + V_{mn} = 0 \quad (7.14)$$

gde je $V_{mn} = \langle m|V|n\rangle$, odnosno

$$c_{nm}^{(1)} = \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (7.15)$$

To su izrazi za popravke energije i talasne funkcije u prvom redu teorije perturbacija. Treba zapaziti da smo, pretpostavljajući da se sve funkcije mogu razviti po $\{|k\rangle\}$, zapravo koristili da je taj skup kompletan tj. da su energetske nivoe nedegenerisani. Sem toga, poslednja jednačina nam *a posteriori* daje uslov za primenljivost teorije perturbacija: korekcije talasne funkcije su male, $c_{nm}^{(1)} \ll 1$, ako je

$$|V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|. \quad (7.16)$$

Sledeća u sistemu je jednačina (7.9) za popravke drugog reda,

$$H_0 \sum c_{nk}^{(2)} |k\rangle + V \sum c_{nk}^{(1)} |k\rangle = E_n^{(0)} \sum c_{nk}^{(2)} |k\rangle + E_n^{(1)} \sum c_{nk}^{(1)} |k\rangle + E_n^{(2)} |n\rangle.$$

Kao i malopre, da bismo našli $E_n^{(2)}$ jednačinu množimo sa $\langle n|$. Dobijamo

$$E_n^{(2)} = \langle n|V \sum c_{nk}^{(1)} |k\rangle = \sum_{k \neq n} \frac{V_{nk} V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \quad (7.17)$$

Množenjem ostalim vektorima $\langle m| \neq \langle n|$ dobija se korekcija talasne funkcije drugog reda koju ovde nećemo eksplicitno pisati. Proces se nastavlja iterativno sve dok se ne dobije tačnost koja odgovara eksperimentalnoj grešci rezultata koji želimo teorijski da opišemo¹.

Ostalo je još da vidimo kako će se promeniti formula za prvu popravku energije (7.13) u slučaju kada je energetske nivo $|n\rangle$ degenerisan. Degeneracija podrazumeva da ima više stanja iste energije, $E_n^{(0)}$: prebrojimo ih dodatnim kvantnim brojem ν ,

$$H_0 |n\nu\rangle = E_n^{(0)} |n\nu\rangle. \quad (7.18)$$

Kao i ranije, bazu $\{|n\nu\rangle\}$ je ortonormiran, $\langle n\nu|k\nu\rangle = \delta_{nk} \delta_{\nu k}$. Jednačina za popravku energije prvog reda u ovom slučaju glasi

$$H_0 \sum c_{n\nu, k\nu}^{(1)} |k\nu\rangle + V|n\nu\rangle = E_n^{(0)} \sum c_{n\nu, k\nu}^{(1)} |k\nu\rangle + E_{n\nu}^{(1)} |n\nu\rangle, \quad (7.19)$$

¹Izvođenje popravki u proizvoljnom redu i rezultati dati su npr. u udžbeniku A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North-Holland 1967.

pa množenjem svojstvenim vektorom $\langle n\mu|$ dobijamo

$$E_{n\nu}^{(1)}\delta_{\mu\nu} = \langle n\mu|V|n\nu\rangle. \quad (7.20)$$

Poslednja formula u stvari znači sledeće: da bismo odredili popravku $E_n^{(1)}$, treba, u potprostoru koji odgovara fiksiranoj vrednosti energije $E_n^{(0)}$, da dijagonalizujemo perturbaciju V odnosno podmatricu $V_{n\mu,n\nu}$. Taj problem je, razume se, mnogo jednostavniji od dijagonalizacije potencijala V u celom prostoru stanja.

Kao prvi primer primene teorije stacionarne perturbacije razmotrićemo *Zeeman-ov efekat*. Zeeman-ovim efektom naziva se promena nivoa energije elektrona u slabom magnetnom polju: odredićemo kako homogeno magnetno polje utiče na energetske nivoe u atomu vodonika. Hamiltonijan elektrona dat je sa

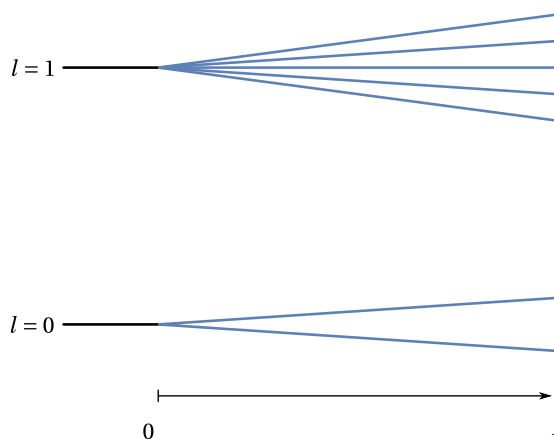
$$H = H_0 + V, \quad (7.21)$$

gde je

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}, \quad V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B, \quad (7.22)$$

ako z -osu usmerimo duž magnetnog polja \vec{B} . Magnetni moment elektrona potiče od spina i od orbitnog momenta impulsa, (4.96), (5.85), pa imamo

$$V = \mu_B B(L_z + 2s_z). \quad (7.23)$$



Slika 7.1: Zeeman-ov efekat.

Da bismo odredili prvu popravku energije treba da dijagonalizujemo perturbaciju V : međutim ona je u bazu stanja $|nlmm_s\rangle$ elektrona u atomu vodonika već dijagonalna. Zato su popravke, analogno (7.13), očekivane vrednosti perturbacije:

$$E_{nlmm_s}^{(1)} = \langle nlmm_s|V|nlm'm'_s\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta_{m_s m'_s} \mu_B B \hbar (m + 2m_s). \quad (7.24)$$

Unošenjem u slabo magnetno polje, n -ti nivo energije vodonikovog atoma se čepa"na više nivoa. Na primer, osnovni nivo $n = 1$ deli se na dva, čije su energije

$$E_1^{(0)} + E_{100\pm\frac{1}{2}}^{(1)} = E_1^{(0)} \pm \mu_B B \hbar. \quad (7.25)$$

Prvi pobuđeni nivo $n = 2$, je osmostruko degenerisan, a moguće vrednosti dodatnih kvantnih brojeva su $l = 0, m = 0, m_s = \pm 1/2$, i $l = 1, m = -1, 0, 1, m_s = \pm 1/2$. On se cepa na pet nivoa,

$$E_2^{(0)} + E_{2lmm_s}^{(1)} = E_2^{(0)} \pm \begin{cases} 0 \\ \mu_B B \hbar \\ 2\mu_B B \hbar \end{cases}. \quad (7.26)$$

Magnetno polje, znači, ne razlikuje sva stanja prvog pobuđenog nivoa, odnosno ne uklanja potpuno degeneraciju po energiji. Perturbacija (7.23) zavisi od vrednosti projekcije ugaonog momenta na pravac magnetnog polja, i zato je svojevremeno kvantni broj operatora L_z nazvan "magnetni kvantni broj", m .

Drugi važan efekat koji se dobro opisuje teorijom perturbacija je *Stark-ov efekat*, odnosno promena energetske nivoa elektrona u slabom električnom polju. Hamiltonijan elektrona u atomu vodonika u homogenom električnom polju \vec{E} dat je sa²

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \vec{d} \cdot \vec{E}, \quad (7.27)$$

a pošto je polje slabo, perturbacija je potencijalna energija električnog dipola elektrona,

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E} = -eEz, \quad (7.28)$$

ako z -osu orijentišemo duž polja. Električno polje ne interaguje sa spinom pa ćemo u notaciji zanemariti spinski stepen slobode: tada je osnovno stanje nedegenerisano. Prva popravka energije osnovnog stanja je

$$E_1^{(1)} = \langle 100|V|100 \rangle = -\frac{1}{\pi a_0^3} \iiint eEr \cos\theta e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi = 0,$$

jer je talasna funkcija osnovnog stanja, $\langle r\theta\varphi|100 \rangle = \psi_{100}$, data sa

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}. \quad (7.29)$$

Prema tome, u prvom redu teorije perturbacija energija osnovnog stanja se ne menja. Pošto je prva popravka nula, postaje relevantna druga popravka energije. Formula (7.17) za drugu popravku je izvedena za slučaj nedegenerisanog spektra, a ovde su svi nivoi energije (sem osnovnog) degenerisani: u formuli za opšti slučaj se sumira po svim stanjima različitim od onog koje popravljamo. Imamo

$$E_1^{(2)} = \sum_{n \neq 1} \frac{|\langle 100|V|nlm \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}. \quad (7.30)$$

Matrični elementi perturbacije su dati integralima

$$\langle 100|-eEz|nlm \rangle = -eE \iiint R_{00}^*(r) Y_0^{0*}(\theta, \varphi) r \cos\theta R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi.$$

Pošto je $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$ a $\cos\theta = \sqrt{4\pi/3} Y_1^0$, možemo da pišemo

$$\langle 100|z|nlm \rangle = \int R_{00}^* R_{nl} r^3 dr \iint \frac{1}{\sqrt{3}} Y_1^{0*} Y_l^m \sin\theta d\theta d\varphi = \frac{1}{\sqrt{3}} \delta_{m0} \delta_{l1} \int R_{00}^* R_{n1} r^3 dr.$$

Poslednji integral nije lako izračunati analitički, ali dobili smo, u principu, rezultat: doprinose daju samo stanja $|n10\rangle$. Druga popravka energije osnovnog stanja je (kao uvek) negativna i naravno, zavisi od kvadrata električnog polja, pa u ovom slučaju govorimo o *kvadratnom Stark-ovom efektu*.

²Linearni Stark-ov efekat za vodonikov atom može se dobiti i egzaktno, rešavanjem jednačine u paraboličkim koordinatama: pogledati npr. u H. A. Bethe, E. E. Salpeter, *Quantum mechanics of one- and two-electron atoms*, Springer, 1957.

Izračunajmo sada kako se menja prvo pobuđeno stanje. Kao i kod osnovnog stanja zanemarimo spinski stepen slobode, pa uzimamo da je prvo pobuđeno stanje četverostruko degenerisano. Označimo odgovarajuće talasne funkcije na sledeći način

$$\begin{aligned}\psi_{200} &= \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} = |1\rangle \\ \psi_{210} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos\theta = |2\rangle \\ \psi_{21\pm 1} &= \mp \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin\theta e^{\pm i\varphi} = |3\rangle, |4\rangle.\end{aligned}$$

Izračunavanjem matičnih elemenata perturbacije, $\tilde{V}_{ab} = \langle a|(-eEz)|b\rangle$, $a, b = 1, 2, 3, 4$, dobijamo podmatricu koju treba dijagonalizovati:

$$\tilde{V} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{E} & 0 & 0 \\ \mathcal{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.31)$$

Skoro svi matični elementi zbog simetrije su nula, a nenulti \tilde{V}_{12} jednak je

$$\mathcal{E} = \langle \psi_{200}|V|\psi_{210}\rangle = -\frac{eE}{12a_0^3} \int_0^\infty \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{a_0}} r^3 dr = 3eEa_0, \quad (7.32)$$

pa dijagonalizacijom \tilde{V} dobijamo da su popravke energije u prvom redu teorije perturbacija

$$E_2^{(1)} = 0, \pm\mathcal{E}. \quad (7.33)$$

Prvi pobuđeni nivo cepa se na tri nivoa.

Kao poslednji primer stacionarne teorije perturbacija pokazaćemo kako se iz nje može dobiti *van der Waals-ova sila* koja (i fenomenološki) opisuje efektivnu interakciju između neutralnih molekula ili atoma. Razmotrimo kao najjednostavniji primer interakciju dva atoma vodonika koji se nalaze na konstantnom međusobnom rastojanju R . Pretpostavićemo da je rastojanje R dovoljno veliko da ne moramo da uzimamo u obzir izmensku interakciju između elektrona, kao i da su oba elektrona u osnovnom stanju. Hamiltonijan za ovaj sistem je

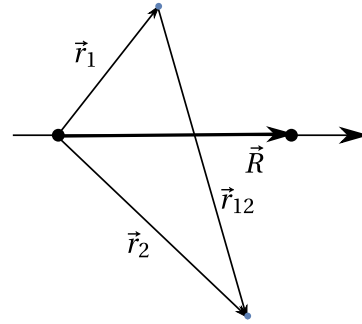
$$H = H_0 + V = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} + V, \quad (7.34)$$

gde smo za neperturbovani hamiltonijan uzeli zbir hamiltonijana elektrona u atomima, a perturbacija je potencijalna energija interakcije,

$$V = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{|\vec{R} + \vec{r}_2 - \vec{r}_1|} - \frac{e^2}{|\vec{R} + \vec{r}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{R} - \vec{r}_1|}. \quad (7.35)$$

Kada se V približno izračuna za velika rastojanja, $R \gg |\vec{r}_1|, |\vec{r}_2|$, koristeći razvoj do drugog reda po malom parametru $a/R \ll 1$,

$$(R^2 + 2\vec{R} \cdot \vec{a} + a^2)^{-1/2} = \frac{1}{R} \left(1 - \frac{\vec{R} \cdot \vec{a}}{R^2} - \frac{1}{2} \frac{a^2}{R^2} + \frac{3}{2} \frac{(\vec{R} \cdot \vec{a})^2}{R^4}\right), \quad (7.36)$$



Slika 7.2: Molekul He_2 sastoji se od dva protona i dva elektrona.

u vodećem, kvadratnom redu dobija se potencijal *dipol-dipol interakcije*,

$$V = \frac{\vec{d}_1 \cdot \vec{d}_2 - 3(\vec{d}_1 \cdot \vec{n})(\vec{d}_2 \cdot \vec{n})}{R^3}. \quad (7.37)$$

Ovde su $\vec{d}_{1,2} = e\vec{r}_{1,2}$ električni dipolni momenti elektrona, a \vec{n} ort pravca koji spaja atome, $\vec{R} = R\vec{n}$. Ako z -osu usmerimo duž \vec{n} dobijamo

$$V = \frac{e^2}{R^3} (x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2). \quad (7.38)$$

Izračunajmo popravku energije koju unosi ova perturbacija kada su oba elektrona u osnovnom stanju, $|100\rangle_1 |100\rangle_2$. U tom slučaju je, očigledno,

$$\langle 100|_1 \langle 100|_2 V |100\rangle_1 |100\rangle_2 = 0, \quad (7.39)$$

odnosno prva popravka je nula. Vodeći doprinos daje druga popravka energije: koristeći formulu (7.17) vidimo da će, nezavisno od konkretnog rezultata za integrale po radijalnim funkcijama, ona imati oblik

$$E_0^{(2)} = V_{vdW} \sim \frac{1}{R^6}. \quad (7.40)$$

Ovo je najčešća zavisnost za van der Waals-ov potencijal koja se dobija u eksperimentu. Jasno je da će rezultat biti drugačiji ako računamo interakciju elektrona u pobuđenim stanjima, ili ako su atomi blizu pa treba uračunati efekte antisimetrizacije talasne funkcije elektrona.

7.2 Varijacioni metod

Varijacioni metod je jedan od aproksimativnih metoda tipičnih za kvantnu mehaniku: koristi se za određivanje energije osnovnog (eventualno, prvog pobuđenog) stanja kada u dobroj ili dovoljnoj meri poznajemo oblik talasne funkcije. Osnova varijacionog metoda je osobina očekivanih vrednosti, teorema: za *funkcional energije* $E[\psi]$,

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (7.41)$$

u svim fizičkim stanjima važi

$$E[\psi] \geq E_0, \quad (7.42)$$

gde je E_0 energija osnovnog stanja. Ovo tvrđenje se svodi na činjenicu koju smo dokazali u drugoj glavi, da je očekivana vrednost operatora uvek veća ili jednaka od njegove minimalne vrednosti.

Iz navedene teoreme sledi da bismo, u principu, energiju E_0 i odgovarajuće osnovno stanje ψ_0 mogli da odredimo variranjem funkcionala energije, odnosno iz uslova

$$\frac{\delta E[\psi]}{\delta \psi} = 0. \quad (7.43)$$

Varijaciona jednačina (7.43) ne rešava se ništa jednostavnije od Schrödinger-ove jednačine. Ali ako imamo neku informaciju o obliku talasne funkcije osnovnog stanja, npr. da može da se aproksimira familijom *probnih funkcija* $\psi(\alpha, \beta, \dots)$ koje zavise od konačnog broja realnih parametara α, β, \dots , onda, umesto na skupu svih stanja, energiju možemo da variramo na podskupu probnih funkcija. Time funkcional $E[\psi]$ postaje funkcija $E(\alpha, \beta, \dots)$, a varijacioni uslov (7.43) se svodi na uslov ekstremuma funkcije više promenljivih,

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial \beta} = 0, \quad \dots \quad (7.44)$$

Rešavanjem jednačine (7.44) dobijaju se vrednosti parametara $(\alpha_0, \beta_0, \dots)$ za koje je $E(\alpha, \beta, \dots)$ minimalna: ona je u datoj aproksimaciji najniža vrednost energije sistema. Naravno, ako se u skupu probnih funkcija nalazi svojstvena funkcija osnovnog stanja, variranjem ćemo dobiti tačnu energiju osnovnog stanja, $E(\alpha_0, \beta_0, \dots) = E_0$.

Kao prvi primer primene varijacionog računa dokazaćemo jednu od osobina jednodimenzionog kretanja: potencijal $V(x)$ za koji važi

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} V(x) dx < 0, \quad (7.45)$$

ima bar jedno vezano stanje. Ovo tvrđenje pokazaćemo tako što ćemo izračunati energiju na skupu (normiranih) probnih funkcija koje eksponencijalno opadaju,

$$\psi_\alpha(x) = \sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|}. \quad (7.46)$$

U ovim stanjima srednja vrednost kinetičke energije je

$$\langle T \rangle_\alpha = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \alpha^2 e^{-2\alpha|x|} dx = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}. \quad (7.47)$$

Srednja vrednost potencijalne energije je negativna,

$$\langle V \rangle_\alpha = \alpha \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha|x|} V(x) dx \approx \alpha \int_{-\infty}^{\infty} V(x) dx < 0, \quad (7.48)$$

kada je parametar α dovoljno mali da se vrednost eksponencijalne funkcije skoro svuda može zameniti jedinicom. To znači da postoji malo α za koje je

$$E_0 \leq E(\alpha) = \langle T \rangle_\alpha + \langle V \rangle_\alpha < 0, \quad (7.49)$$

jer kinetička energija zavisi od parametra α kvadratno, a potencijalna linearno. Pošto su asimptotske vrednosti potencijala nula, minimalna, negativna svojstvena vrednost energije E_0 odgovara vezanom stanju.

Primenom varijacionog računa sa velikom tačnošću se može izračunati energija osnovnog stanja atoma helijuma. Ako se zanemari interakcija između elektrona i spin-orbitna interakcija, osnovno stanje je, zbog identičnosti elektrona, dato sa

$$|100\rangle_1 \otimes |100\rangle_2 \otimes |s=0, m_s=0\rangle, \quad (7.50)$$

gde je $|100\rangle$ svojstvena funkcija osnovnog stanja elektrona u vodoniku sličnom atomu sa $Z = 2$. Stanje je spinski singlet. Pretpostavimo da je prostorni deo talasne funkcije modifikovan, tako da umesto naelektrisanja $Z = 2$ u njoj figuriše *efektivno naelektrisanje* ζ koje je varijacioni parametar:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = A e^{-\frac{\zeta}{a_0} r_1} e^{-\frac{\zeta}{a_0} r_2} = \frac{\zeta^3}{\pi a_0^3} e^{-\frac{\zeta}{a_0} (r_1+r_2)}. \quad (7.51)$$

U poslednjoj jednakosti zamenjena je konstanta normiranja A , a $a_0 = \hbar^2 / (me^2)$ je Bohr-ov radijus. Izračunavanjem očekivanih vrednosti kinetičke i potencijalne energije (5.175) za probne funkcije (7.51) dobijamo

$$\langle T_1 + T_2 \rangle = \frac{e^2}{a_0} \zeta^2, \quad \langle V_1 + V_2 \rangle = -2Z \frac{e^2}{a_0} \zeta, \quad \langle V_{12} \rangle = \frac{5}{8} \frac{e^2}{a_0} \zeta. \quad (7.52)$$

Prva dva integrala se računaju pravolinijski primenom Γ -funkcije, a da bi se izračunao poslednji treba da se primeni razvoj po sfernim harmonicima (4.121-4.122). Za integraciju po uglovima koristimo da je $Y_0^0(\theta_1, \varphi_1) = 1/\sqrt{4\pi}$,

$$\iint \sin\theta d\theta d\varphi Y_l^{m*} = \sqrt{4\pi} \iint \sin\theta d\theta d\varphi Y_l^{m*} Y_0^0 = \sqrt{4\pi} \delta_{l0} \delta_{m0}, \quad (7.53)$$

pa ostaje integral

$$\begin{aligned} \langle V_{12} \rangle &= -\frac{16e^2\zeta^6}{a_0^2} \iint dr_1 dr_2 \frac{r_1^2 r_2^2}{r_{>}} e^{-\frac{2\zeta}{a_0} (r_1+r_2)} \\ &= -\frac{16e^2\zeta^6}{a_0^2} \int_0^\infty dr_1 \left(\int_0^{r_1} dr_2 r_1 r_2^2 e^{-\frac{2\zeta}{a_0} (r_1+r_2)} + \int_{r_1}^\infty dr_2 r_1^2 r_2 e^{-\frac{2\zeta}{a_0} (r_1+r_2)} \right). \end{aligned}$$

Minimalna vrednost energije dobija se za vrednost parametra $\zeta_0 = 27/16$, ($\zeta_0 < 2$), i jednaka je $E(\zeta_0) = -77.5$ eV, dok je eksperimentalna vrednost energije osnovnog stanja $E_0 = -78.9$ eV.

Kao poslednju primenu varijacionog računa analiziraćemo talasnu funkciju i energiju osnovnog stanja elektrona u molekulu vodonika, ili preciznije u jonu molekula vodonika, H_2^+ . Problem kretanja elektrona u elektrostatičkom potencijalu dva protona koji miruju spada u rešive kvantnomehantičke probleme i rešava se u parabolickim koordinatama. Mi ćemo ga analizirati približno: metod koji se koristi je uopštena varijanta varijacionog metoda jer varijacioni parametar R , rastojanje između jezgara, figuriše i u hamiltonijanu i u talasnoj funkciji.

Jon molekula vodonika se sastoji iz dva protona koje ćemo označiti sa a i b , i jednog elektrona. Njegova energija data je sa

$$\begin{aligned} H &= \frac{\vec{p}_a^2}{2M} + \frac{\vec{p}_b^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b), \\ V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b) &= -\frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_a|} - \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_b|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|}. \end{aligned} \quad (7.54)$$

Pretpostavićemo da je kinetička energija protona mnogo manja od kinetičke energije elektrona, tako da u prvoj aproksimaciji možemo smatrati da protoni miruju, odnosno da se kreću mnogo sporije nego elektron. U skladu sa tom pretpostavkom uvodimo koordinatni sistem na sledeći način:

$$\vec{r}_a = 0, \quad \vec{r}_b - \vec{r}_a = \vec{R} = R\vec{e}_z. \quad (7.55)$$

Pretpostavka da se kretanje elektrona i protona može razdvojiti naziva se *Born-Oppenheimer-ova aproksimacija* i precizno se formuliše kao razdvajanje promenljivih. U Born-Oppenheimer-ovoj aproksimaciji molekula opisuje talasna funkcija oblika

$$\Psi(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b) = \psi(\vec{r}) \phi(\vec{r}_a, \vec{r}_b), \quad (7.56)$$

gde je stanje elektrona $\psi(\vec{r})$ rešenje Schrödinger-ove jednačine

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V \right) \psi(\vec{r}) = E(R) \psi(\vec{r}), \quad (7.57)$$

a potencijalna energija V napisana je za jezgra koja su fiksirana na rastojanju R , (7.55),

$$V = V_R(\vec{r}) = \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{R}|}. \quad (7.58)$$

Zamenom elektronske talasne funkcije u Schrödinger-ovu jednačinu za molekula

$$\left(\frac{\vec{p}_a^2}{2M} + \frac{\vec{p}_b^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2m} + V \right) \psi(\vec{r}) \phi(\vec{r}_a, \vec{r}_b) = \mathcal{E} \psi(\vec{r}) \phi(\vec{r}_a, \vec{r}_b) \quad (7.59)$$

dobijamo jednačinu za talasnu funkciju jezgara, $\phi(\vec{r}_a, \vec{r}_b)$

$$\left(\frac{\vec{p}_a^2}{2M} + \frac{\vec{p}_b^2}{2M} + E(R) \right) \phi(\vec{r}_a, \vec{r}_b) = \mathcal{E} \phi(\vec{r}_a, \vec{r}_b), \quad (7.60)$$

iz koje vidimo da je svojstvena vrednost $E(R)$ iz (7.57) u stvari *efektivni elektrostatički potencijal* u kome se kreću jezgra. Minimum ovog potencijala daje ravnotežno rastojanje jezgara u molekulu, a razvojem $E(R)$ oko minimuma i rešavanjem jednačine (7.60) dobijamo *vibracioni spektar* molekula.

Vratimo se na kretanje elektrona. Kao što smo napomenuli, jednačina (7.57) za elektron u jonu H_2^+ može da se reši egzaktno: njena svojstvena stanja nazivaju se *molekulske orbitale*. Međutim, kod komplikovanijih molekula po pravilu ne poznajemo tačna svojstvena stanja pa se postavlja pitanje, kako da ih aproksimiramo? Jedna mogućnost je da ih prikažemo kao superpoziciju stanja elektrona u pojedinim atomima: takve talasne funkcije su *linearne kombinacije atomskih orbitala*. Kada određujemo osnovno stanje elektrona u molekulu, prirodno je da uzmemo linearnu kombinaciju osnovnih stanja elektrona u atomima,

$$\psi(\vec{r}) = \alpha \psi_a + \beta \psi_b = \alpha \psi_0(\vec{r} - \vec{r}_a) + \beta \psi_0(\vec{r} - \vec{r}_b), \quad (7.61)$$

gde je

$$\psi_a = \psi_0(\vec{r} - \vec{r}_a) = e^{-\frac{r}{a_0}}, \quad \psi_b = \psi_0(\vec{r} - \vec{r}_b) = e^{-\frac{|\vec{r} - \vec{R}|}{a_0}}, \quad (7.62)$$

a kao i ranije, a_0 je Bohr-ov radijus. U principu, jedan od parametara α , β bi mogao da bude varijacioni parametar, ali ne u ovom problemu: kod molekula vodonika jezgra su identična, tako da izmena $a \leftrightarrow b$ tj. $\vec{r}_a \leftrightarrow \vec{r}_b$ ne menja sistem, a talasnu funkciju (7.61) može da promeni samo za fazni faktor. Zato je $\alpha = \pm \beta$: moguće su samo dve talasne funkcije, simetrična i antisimetrična,

$$\psi_{\pm} = e^{-\frac{r}{a_0}} \pm e^{-\frac{|\vec{r} - \vec{R}|}{a_0}} = \psi_a \pm \psi_b. \quad (7.63)$$

Kvadrat norme talasne funkcije dobija se malo dužim računom u kome je važno uočiti, kao i pri računanju očekivane vrednosti interakcije elektrona u atomu He, da integral po radialnoj promenljivoj r treba da se подели na dva, $r < R$ i $r > R$. Rezultat integracije je

$$\langle \psi_{\pm} | \psi_{\pm} \rangle = 2\pi a_0^3 (1 \pm S). \quad (7.64)$$

S je proporcionalno integralu preklapanja

$$S = \frac{1}{\pi a_0^3} \int d^3 r e^{-\frac{r}{a_0} - \frac{|\vec{r}-\vec{R}|}{a_0}} = e^{-\zeta} \left(1 + \zeta + \frac{\zeta^2}{3} \right), \quad (7.65)$$

a ζ je bezdimenzijski varijacioni parametar, $\zeta = R/a_0$.

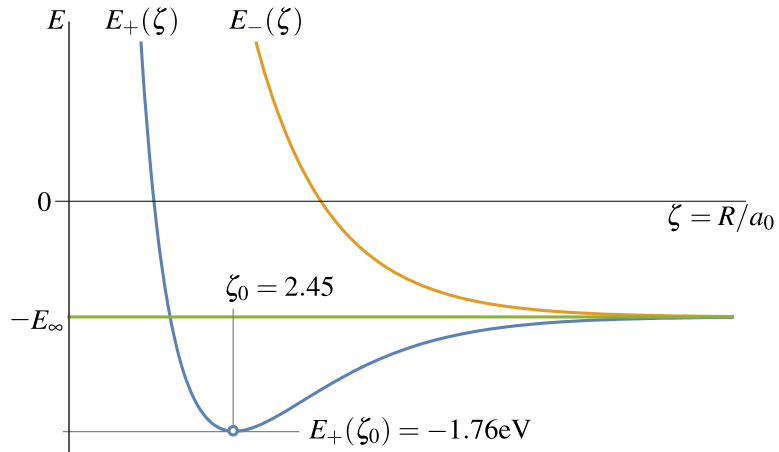
Sledeći korak je da se izračuna očekivana vrednost energije. Imamo

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\pm} | \frac{\vec{p}^2}{2m} + V | \psi_{\pm} \rangle &= \int d^3 r (\psi_a \pm \psi_b) \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{R}|} + \frac{e^2}{R} \right) (\psi_a \pm \psi_b) \\ &= \int d^3 r \psi_a \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{R}|} + \frac{e^2}{R} \right) \psi_a + (a \leftrightarrow b) \end{aligned} \quad (7.66)$$

$$\pm \int d^3 r \psi_a \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{R}|} + \frac{e^2}{R} \right) \psi_b + (a \leftrightarrow b) \quad (7.67)$$

$$\equiv 2\pi a_0^3 (H_{aa} \pm H_{ab}) \quad (7.68)$$

gde su sa H_{aa} i H_{ab} označeni integrali koji odgovaraju izrazima u (7.66) i (7.67) (ako se uradi smena $\vec{r} \rightarrow \vec{r} - \vec{R}$, vidi se da su integrali koji se dobijaju zamenom $a \leftrightarrow b$ jednaki). Posle relativno dugačkog računa dobija se



Slika 7.3: Zavisnost energije elektrona od rastojanja između protona u jonu vodonika H_2^+ .

$$H_{aa} = -E_{\infty} + \frac{e^2}{\zeta a_0} (1 + \zeta) e^{-2\zeta}, \quad (7.69)$$

$$H_{ab} = S(-E_{\infty} + \frac{e^2}{\zeta a_0}) - \frac{e^2}{a_0} (1 + \zeta) e^{-\zeta}, \quad (7.70)$$

gde je $E_{\infty} = e^2/(2a_0)$ energija jonizacije. Energije simetričnog i antisimetričnog stanja su

$$E_{\pm} = \frac{2\pi a_0^3 (H_{aa} \pm H_{ab})}{2\pi a_0^3 (1 \pm S)} = -E_{\infty} + \frac{e^2}{a_0} \frac{(1 + \zeta) e^{-2\zeta} \pm (1 - \frac{2\zeta^2}{3}) e^{-\zeta}}{\zeta (1 \pm (1 + \zeta + \frac{\zeta^2}{3}) e^{-\zeta})}. \quad (7.71)$$

Zavisnost energije od rastojanja između protona, R , najbolje se vidi na slici: obe vrednosti E_{\pm} imaju asimptotu $-E_{\infty}$. Međutim, antisimetrična funkcija ψ_- nema minimum pa je *nevezujuća*, a prava ili *vezujuća* orbitala je simetrična funkcija ψ_+ . Minimalna vrednost rastojanja R može da se odredi numeričkim rešavanjem uslova ekstremuma i iznosi $R_0 = 1.3 \cdot 10^{-10}$ m a odgovarajuća energija je $E_+(R_0) = -1.76$ eV; egzaktno rešenje, sa druge strane, daje $R_{\min} = 1.06 \cdot 10^{-10}$ m i energiju osnovnog stanja, $E_0 = -2.8$ eV.

7.3 Vremenski zavisna perturbacija

Kao što ime kaže, kod vremenski zavisne perturbacije perturbacija polaznog hamiltonijana u principu zavisi od vremena. To je tipična situacija kod realnih fizičkih sistema: po pravilu, sistem ne možemo u potpunosti da izolujemo nego samo "najvećim delom" jer je on uvek u interakciji sa okolinom, a interakcija nije konstantna u vremenu: nekada se opisuje i stohastički. Mi ćemo pretpostaviti da je funkcija $V(t)$ poznata. Dakle, posmatramo sistem

$$H(t) = H_0 + V(t). \quad (7.72)$$

Pošto hamiltonijan zavisi od vremena, sistem nema stacionarna stanja. Međutim ako je perturbacija V mala, ima smisla da se on karakteriše svojstvenim stanjima osnovnog hamiltonijana H_0 : jedino što su u prisustvu perturbacije mogući prelazi između stanja. Zadatak teorije vremenski zavisne perturbacije je da odredi verovatnoće tih prelaza.

Da ponovimo kratko kako se dobija opšte rešenje Schrödinger-ove jednačine za konzervativni sistem. Kada hamiltonijan H_0 ne zavisi od vremena u Schrödinger-ovoj jednačini

$$i\hbar \frac{d|\Psi_0(t)\rangle}{dt} = H_0|\Psi_0(t)\rangle \quad (7.73)$$

vremenska promenljiva može da se razdvoji od prostornih. Partikularna rešenja su

$$|n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |n\rangle, \quad (7.74)$$

gde su sa $|n\rangle$ obeležena svojstvena stanja hamiltonijana H_0 ,

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle. \quad (7.75)$$

Pretpostavimo zbog jednostavnosti da je spektar energije nedegenerisan. Opšte rešenje $|\Psi_0(t)\rangle$ je linearna kombinacija partikularnih rešenja (7.74),

$$|\Psi_0(t)\rangle = \sum_k c_k |k(t)\rangle, \quad (7.76)$$

a koeficijenti c_k su proizvoljne konstante (koje zadovoljavaju uslov normiranja). Iz relacije (7.74) vidimo da su svojstvena stanja energije $|n(t)\rangle$ stacionarna: njihova promena u vremenu svodi se na promenu faznog faktora, dok se gustina verovatnoće i očekivane vrednosti ne menjaju. Zato sistem koji je potpuno izolovan ostaje u osnovnom ili pobuđenom stanju energije beskonačno dugo.

I za perturbovani hamiltonijan (7.72) stanje $|\Psi(t)\rangle$, razume se, može da se razvije po svojstvenom bazu neperturbovanog hamiltonijana,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k C_k(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} |k\rangle. \quad (7.77)$$

Ova formula je slična sa (7.74), samo što u njoj koeficijenti razvoja C_k zavise od vremena. Schrödinger-ova jednačina određuje dinamiku, $C_k(t)$: iz

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = (H_0 + V)|\Psi(t)\rangle \quad (7.78)$$

sledi

$$i\hbar \sum_k \frac{dC_k}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} |k\rangle = \sum_k C_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} V|k\rangle. \quad (7.79)$$

Množenjem poslednje relacije sa $e^{\frac{i}{\hbar}E_m t} \langle m|$ dobijamo sistem jednačina za koeficijente:

$$i\hbar \frac{dC_m}{dt} = \sum_{k=0}^{\infty} C_k e^{i\omega_{mk}t} V_{mk}, \quad (7.80)$$

gde smo uveli

$$\omega_{km} = \frac{E_k - E_m}{\hbar}, \quad V_{mk} = \langle m|V|k\rangle. \quad (7.81)$$

Sistem (7.80) je ekzaktno. Međutim, u njemu ima beskonačno mnogo jednačina jer bazis $\{|k\rangle\}$ ima beskonačno mnogo elemenata: zato ćemo iskoristiti pretpostavku da je perturbacija mala, i sistem rešavati približno. Videćemo u sledećem poglavlju, u važnom slučaju dva (malog broja) stepena slobode, poslednja jednačina može da se reši i ekzaktno.

Zanima nas verovatnoća da sistem, ako se u početnom trenutku nalazi u stanju $|n\rangle$, u trenutku t pređe u stanje $|m\rangle$. Ta verovatnoća je $|C_m(t)|^2$, pri čemu je početni uslov $|\Psi(0)\rangle = |n\rangle$ u stvari

$$C_k(0) = \delta_{nk}, \quad (7.82)$$

tj. u početnom trenutku svi koeficijenti u razvoju su nula osim n -tog koji je jedinica. Pošto je V malo, ovi koeficijenti se evolucijom neće mnogo promeniti: u trenutku t svi $C_k(t)$, $k \neq n$, biće mali odnosno blizu nule, dok je $C_n(t)$ blizu jedinice. Pošto je desna strana jednačine (7.80) linearna po malom parametru po kome razvijamo, V_{mk} , na desnoj strani možemo da uzmemo da je $C_k(t) = \delta_{nk}$. U vodećoj aproksimaciji dobijamo

$$i\hbar \frac{dC_m(t)}{dt} = e^{-i\omega_{nm}t} V_{mn}. \quad (7.83)$$

Pretpostavkom da je perturbacija mala, sistem od beskonačno mnogo spregnutih jednačina (7.80) sveo se na jednostavne nezavisne jednačine (7.83) čije je rešenje

$$C_m(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{mn}t} V_{mn} dt, \quad m \neq n,$$

a verovatnoća prelaza iz stanja $|n\rangle$ u početnom trenutku, u stanje $|m\rangle$ u trenutku t je data sa

$$|C_m(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{mn}t} V_{mn} dt \right|^2. \quad (7.84)$$

Između ostalog vidimo da je, zbog apsolutne vrednosti u (7.84) i zbog realnosti potencijala $V_{mn} = V_{nm}^*$, verovatnoća prelaza iz $|n\rangle$ u $|m\rangle$ jednaka verovatnoći prelaza iz $|m\rangle$ u $|n\rangle$. Formula naravno važi i kada perturbacija ne zavisi od vremena: ako u tom slučaju, ako računamo verovatnoću prelaza iz stanja $|n\rangle$ u $t = -\infty$ u stanje $|m\rangle$ u $t = +\infty$, dobijamo

$$C_m(\infty) = -\frac{i}{\hbar} V_{mn} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_{mn}t} dt = -2\pi i V_{mn} \delta(E_m - E_n), \quad (7.85)$$

odnosno zakon održanja energije.

7.4 Rezonanca u sistemu sa dva nivoa

Razmatračemo sada jednačine (7.80) u slučaju sistema od dva stepena slobode i harmonijske perturbacije, ali ekzaktno. Hamiltonijan je oblika

$$H = H_0 + V(t) = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \gamma e^{-i\omega t} \\ \gamma e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.86)$$

Koeficijent γ je realan, $\gamma = \gamma^*$, a uzećemo da stanje $|1\rangle$ ima nižu energiju od stanja $|2\rangle$, $E_2 > E_1$. Želimo da odredimo verovatnoću da sistem koji je u početnom trenutku $t = 0$ u nižem energetsom stanju, u kasnijem trenutku t pređe u stanje više energije. Drugim rečima, početni uslovi su $C_1(0) = 1$, $C_2(0) = 0$.

Jednačine za koeficijente $C_k(t)$ su u ovom slučaju

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = \gamma e^{i(\omega_{12}-\omega)t} C_2, \quad i\hbar \frac{dC_2}{dt} = \gamma e^{-i(\omega_{12}-\omega)t} C_1. \quad (7.87)$$

Diferenciranjem druge jednačine po vremenu dobijamo

$$i \frac{d^2 C_2}{dt^2} = -i(\omega_{12} - \omega) \frac{\gamma}{\hbar} e^{-i(\omega_{12}-\omega)t} C_1 + \frac{\gamma}{\hbar} e^{-i(\omega_{12}-\omega)t} \frac{dC_1}{dt} = (\omega_{12} - \omega) \frac{dC_2}{dt} - i \frac{\gamma^2}{\hbar^2} C_2. \quad (7.88)$$

Pretpostavljajući da su rešenja oblika $C_2(t) = e^{\alpha t}$, za α dobijamo

$$\alpha_{1,2} = -i \left(\frac{\omega_{12} - \omega}{2} \pm \Omega \right), \quad \Omega = \sqrt{\frac{(\omega_{12} - \omega)^2}{4} + \frac{\gamma^2}{\hbar^2}}. \quad (7.89)$$

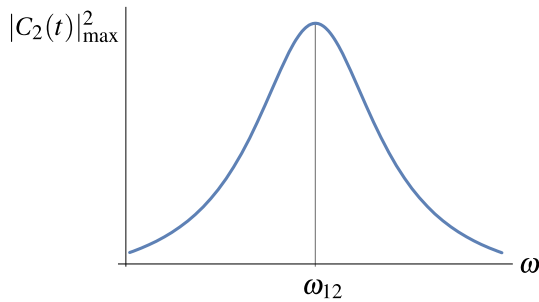
Opšte rešenje za $C_2(t)$ je linearna kombinacija partikularnih rešenja,

$$C_2(t) = e^{-\frac{i}{2}(\omega_{12}-\omega)t} (A \sin \Omega t + B \cos \Omega t), \quad (7.90)$$

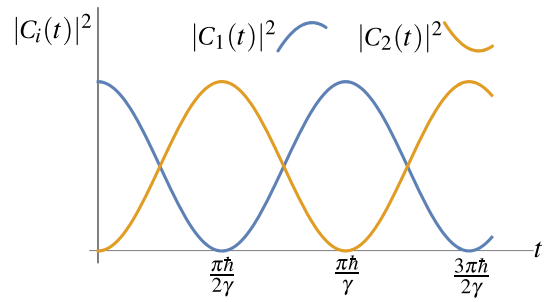
a uslov $C_2(0) = 0$ daje $B = 0$. Iz polaznog sistema dobijamo i $C_1(t)$,

$$C_1(t) = A \frac{i\hbar}{\gamma} e^{\frac{i}{2}(\omega_{12}-\omega)t} \left(\Omega \cos \Omega t - \frac{i(\omega_{12} - \omega)}{2} \sin \Omega t \right), \quad (7.91)$$

a početni uslov $C_1(0) = 1$ fiksira A , $iA = \gamma/(\hbar\Omega)$. Verovatnoća prelaza iz stanja $|1\rangle$ u početnom



Slika 7.4: Grafik $|C_2(t)|_{\max}^2$ u funkciji od ω . Ovde je ω_{21} rezonantna frekvencija.



Slika 7.5: Zavisnost $|C_1(t)|^2$ i $|C_2(t)|^2$ od vremena t na rezonantnoj frekvenciji ω_{21} .

trenutku u stanje $|2\rangle$ u trenutku t data je *Rabi-jevom formulom*,

$$|C_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \Omega t}{\Omega^2}. \quad (7.92)$$

Vidimo da delovanjem periodične perturbacije sistem možemo da prebacimo iz stanja niže u stanje više energije ili obratno. Verovatnoća prelaza je najveća kada je frekvencija perturbacije jednaka prirodnoj frekvenci sistema odnosno razlici energetske nivoa, $\omega = \omega_{21}$ (slika 7.4): ova pojava, kao i u klasičnoj mehanici, naziva se *rezonanca*.

Ispostavlja se da je za primene u fizici mnogo interesantnija stimulirana emisija nego apsorpcija, jer daje izvore koherentnih elektromagnetnih talasa, lasere i masere. Ona se može ostvariti, u najjednostavnijem slučaju, putem interakcije sistema sa dva stepena slobode sa elektromagnetnim poljem. Postoji zapravo nekoliko izuzetno važnih fizičkih sistema koji efektivno (tj. u procesima koje posmatramo) imaju dva stepena slobode: kao primer navešćemo amonijačni maser. Molekul amonijaka NH_3 ima oblik tetraedra u čijim su temenima jedan atom azota i tri atoma vodonika. Klasično, postoje dve konfiguracije molekula koje odgovaraju minimumu potencijalne energije: ona u kojoj je N-atom sa leve strane ravni koju obrazuju tri H-atoma, $|L\rangle$, i ona u kojoj je N-atom zdesna, $|R\rangle$. Za prelaz iz jedne u drugu konfiguraciju potrebno je dodati energiju: kriva potencijalne energije sistema je opisana *double-well* potencijalom. Sa druge strane, u kvantnom opisu zbog tuneliranja osnovno stanje nije lokalizovano na levu ili desnu stranu: pošto je potencijal (kao i ceo hamiltonijan) invarijantan na parnost, svojstvena stanja energije su parna ili neparna. Pri tome, nižu vrednost energije ima $|S\rangle$:

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|L\rangle + |R\rangle) = |1\rangle, \quad |A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|L\rangle - |R\rangle) = |2\rangle. \quad (7.93)$$

Osnovno stanje energije nije degenerisano: $E_1 < E_2$, ali je razlika energija mala, $(E_2 - E_1)/\hbar \sim 24000$ MHz. Zbog blizine energetske nivoa ova dva stanja možemo posmatrati kao sistem od dva stepena slobode (dok radimo sa spoljašnjim poljima koja ne pobuđuju više energetske nivoe). Molekul NH_3 poseduje još jednu važnu osobinu: stanja $|1\rangle$ i $|2\rangle$ se, slično spinskim stanjima u Stern-Gerlach-ovom eksperimentu, mogu prostorno razdvojiti primenom nehomogenog električnog polja.

Amonijačni maser se konstruiše na sledeći način. Pomoću separatora, nehomogenog električnog polja, iz snopa molekula amonijaka izdvoji se podsistem koji je u stanju $|2\rangle$; podsistem se usmerava ka šupljini sa mikrotalasnim zračenjem frekvence $\omega \approx \omega_{21}$,

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}. \quad (7.94)$$

Interakcija NH_3 molekula sa poljem je dominantno dipolna,

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E} \sim -E_0 d e^{i\omega t}, \quad (7.95)$$

gde je sa \vec{d} označen električni dipolni moment molekula. Zbog osobina simetričnog i antisimetričnog stanja na izmenu $L \leftrightarrow R$, odnosno na parnost, imamo

$$V_{11} = 0, \quad V_{22} = 0, \quad (7.96)$$

pa se perturbacija svodi na (7.86) sa $\gamma = -E_0 d$. Ako je veličina šupljine tako podešena da snop iz nje izlazi u trenutku

$$t \sim \frac{T}{2} = \frac{\pi \hbar}{2\gamma}, \quad (7.97)$$

na izlasku iz šupljine svi molekuli biće u stanju $|1\rangle$. Snop u šupljini emituje fotone, odnosno amplifikira (pojačava) već postojeće mikrotalasno zračenje. Što je γ manje, izračeni talasi imaju manju neodređenost frekvence: emitovano zračenje je *koherentno*.

7.5 Periodična perturbacija

U ovom poglavlju razmatraćemo rezonantne efekte kod sistema sa beskonačno mnogo stepeni slobode primenom teorije perturbacija. Pretpostavićemo kao i ranije da je perturbacija harmonijska,

$$V(t) = -U^\dagger e^{i\omega t} - U e^{-i\omega t} = -2U \cos \omega t, \quad (7.98)$$

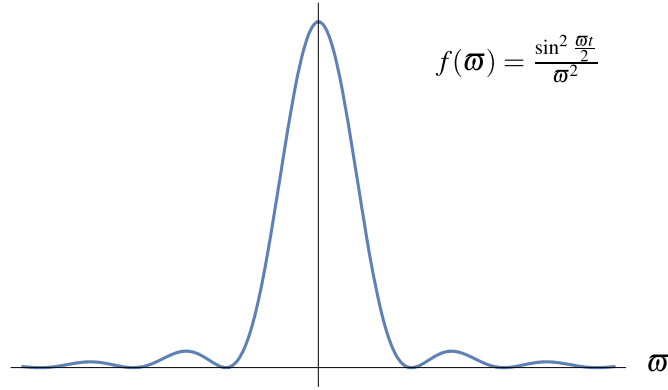
gde je U vremenski nezavisan hermitski operator, $U = U^\dagger$. Primenjujući formalizam razvijen ranije i formulu (7.84), za koeficijente $C_m(t)$ dobijamo

$$C_m(t) = \frac{U_{mn}}{\hbar} \left(\frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} - 1}{\omega_{mn} - \omega} + \frac{e^{i(\omega_{mn}+\omega)t} - 1}{\omega_{mn} + \omega} \right). \quad (7.99)$$

Ova formula opisuje dva (moguća) procesa: prvi član, apsorpciju energije spoljašnjeg polja, a drugi, stimulisanu emisiju. Ako razmatramo samo apsorpciju, prvi sabirak je mnogo veći u relevantnom domenu frekvenci $\omega \approx \omega_{mn}$, pa drugi sabirak možemo da zanemarimo. Za verovatnoću prelaza se dobija

$$|C_m(t)|^2 = \frac{|U_{mn}|^2}{\hbar^2} \frac{4 \sin^2 \frac{(\omega_{mn}-\omega)t}{2}}{(\omega_{mn} - \omega)^2}. \quad (7.100)$$

Ova funkcija se donekle razlikuje od egzaktnog izraza (7.92) koji smo dobili za sistem sa dva stepena slobode, ali u principu ima isti oblik i opisuje isti fizički fenomen: *rezonancu*. Pri fiksiranoj frekvenci ω verovatnoća prelaza iz stanja $|n\rangle$ je najveća u stanje $|m\rangle$ za koje je $\omega_{mn} = \omega$, tj. najverovatnije je da će sistem apsorbovati kvant energije $\hbar\omega$ ako je on baš jednak razlici energetskih nivoa, $E_m = E_n + \hbar\omega$. Na slici 7.6 je prikazana funkcija $f(\omega) = \sin^2(\omega t/2)/\omega^2$. Funkcija ima maksimum u $\omega = 0$: visina maksimuma je proporcionalna sa t^2 , a širina sa $1/t$.



Slika 7.6: Funkcija $f(\omega) = \sin^2(\omega t/2)/\omega^2$.

Kada t raste, raste i visina maksimuma funkcije $f(\omega)$. U stvari, u limesu $t \rightarrow \infty$ dobija se δ -funkcija: ovu reprezentaciju već smo uveli,

$$\delta(\omega) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \omega t}{\pi t \omega^2}. \quad (7.101)$$

Zbog toga, ako je interval T u kome deluje perturbacija dovoljno dugačak, važi

$$|C_m|^2 = \frac{\pi}{\hbar^2} |U_{mn}|^2 \delta\left(\frac{\omega_{mn} - \omega}{2}\right) T = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{mn}|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\omega) T.$$

Formula za verovatnoću prelaza može se primeniti i kada krajnje stanje $|v\rangle$ pripada kontinualnom delu spektra, odnosno predstavlja nevezano stanje: u atomskoj fizici, ovo odgovara *jonizaciji* atoma. Naravno, potrebno je da spoljašnje polje ima dovoljno energije da jonizuje

atom, $\hbar\omega > E_\infty - E_n$. Ukoliko je energija E_ν degenerisana, verovatnoća prelaza dobija se kada se izraz (7.84) pomnoži multiplicitetom stanja $|\nu\rangle$, $g(E_\nu)$. Dobijamo kao malopre

$$\frac{|C_\nu|^2}{T} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{\nu n}|^2 g(E_\nu) \delta(E_\nu - E_n - \hbar\omega),$$

pa je ukupna verovatnoća jonizacije u jedinici vremena

$$\Gamma = \int \frac{|C_\nu|^2}{T} dE_\nu = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{\nu n}|^2 g(E_\nu). \quad (7.102)$$

Formula (7.102) naziva se *Fermi-jevo zlatno pravilo*.

7.6 Dipolni prelazi u atomu

Najvažniji primer rezonance su apsorpcija i emisija svetlosti u atomu odnosno atomski spektri. Elektron u atomu, ako se zanemari interakcija sa ostalim elektronima, opisan je hamiltonijanom

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}, \quad (7.103)$$

a njegova svojstvena stanja se karakterišu kvantnim brojevima energije, orbitnog i spinskog ugaonog momenta, $|nlmm_s\rangle$. Ova stanja su svojstvena i kada elektrostatičku interakciju među elektronima prikažemo kao usrednjeni sferno-simetrični potencijal.

U prisustvu elektromagnetnog talasa hamiltonijan elektrona dobija se minimalnom zame-nom (4.85),

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{Ze^2}{r}. \quad (7.104)$$

Pretpostavićemo da je elektromagnetni talas linearno polarisan sa polarizacijom \vec{e} . Tada je njegov vektorski potencijal \vec{A} dat sa

$$\vec{A} = 2A_0 \vec{e} \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (7.105)$$

a električno i magnetno polje su

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \frac{2A_0\omega}{c} \vec{e} \sin(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}), \quad \vec{B} = \text{rot } \vec{A} = -2A_0 \vec{k} \times \vec{e} \sin(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}). \quad (7.106)$$

Razume se, $\vec{e} \cdot \vec{k} = 0$, $\omega^2 = c^2 k^2$. Energija interakcije sa spoljašnjim poljem je najčešće mala pa se kvadratni deo interakcionog člana može zanemariti, a linearni član tretiramo kao perturbaciju:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} - \frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{p} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} + V. \quad (7.107)$$

U procesima emisije i apsorpcije svetlosti električno i magnetno polje praktično su konstantni u celoj zapremini atoma. To se vidi iz sledeće ocene: karakteristične dimenzije atoma su reda veličine Bohr-ovog radijusa, $0.5 \cdot 10^{-10}$ m, dok su tipične talasne dužine svetlosti, npr. žuta linija natrijuma, $687 \cdot 10^{-9}$ m: za 3 ili 4 reda veličine veće. Prema tome, za navedene procese u sinusu i kosinusu u (7.105) izraz $\vec{k} \cdot \vec{r}$ možemo da zamenimo nulom, i time se dobija vodeći red u teoriji perturbacija. Dalje, lako se proverava da je odnos veličina interakcije elektrona sa magnetnim i električnim poljem elektromagnetnog talasa, $V_B/V_E \sim p/(mc)$, pa je za nerelativistička kretanja dominantna interakcija sa električnim poljem. Zaključujemo da je najvažniji deo interakcionog člana V dipolna interakcija

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E} \approx \frac{ie\omega}{c} A_0 (\vec{r} \cdot \vec{e}) (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}). \quad (7.108)$$

Ova aproksimacija zove se *dipolna aproksimacija*.

Dipolna aproksimacija može se, možda za nijansu preciznije, izvesti direktno iz (7.107). Primenjujuću uslov $kr \approx 0$ i zadržavajući u interakcionom članu samo deo odgovoran za apsorpciju svetlosti, dobijamo

$$V = -\frac{e}{mc} A_0 (\vec{p} \cdot \vec{\epsilon}) e^{i\omega t}. \quad (7.109)$$

Kada računamo matrične elemente

$$\langle k | \vec{p} \cdot \vec{\epsilon} | n \rangle = \epsilon_i \langle k | p_i | n \rangle, \quad (7.110)$$

možemo da koristimo da je

$$[x_i, H_0] = \left[x_i, \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \right] = \frac{i\hbar}{m} p_i. \quad (7.111)$$

Zato imamo

$$\epsilon_i \langle k | p_i | n \rangle = \frac{m}{i\hbar} \epsilon_i \langle k | [x_i, H_0] | n \rangle = i m \omega_{kn} \langle k | \vec{r} \cdot \vec{\epsilon} | n \rangle. \quad (7.112)$$

Za matrični element dobija se izraz (7.113) do na zamenu $\omega \rightarrow \omega_{kn}$, a ove dve frekvence su u rezonanci jednake.

Znači, u procesima apsorpcije i emisije svetlosti perturbacija je periodična, a verovatnoća prelaza sa nivoa E_n na nivo E_k je data formulom (7.100). Ta verovatnoća je određena matričnim elementom projekcije električnog dipola na vektor polarizacije,

$$V_{kn} = \frac{i\omega}{c} A_0 \langle k | e\vec{r} \cdot \vec{\epsilon} | n \rangle. \quad (7.113)$$

Verovatnoća prelaza je jednaka nuli kada je V_{kn} jednak nuli: takvi prelazi nazivaju se *zabranjenim prelazima* jer je intenzitet odgovarajućih spektralnih linija mnogo manji od intenziteta ostalih linija. Analizom matričnih elemenata operatora električnog dipola mogu se dobiti *selekciona pravila* za dipolne prelaze, odnosno uslovi koji određuju koji su prelazi dozvoljeni a koji zabranjeni. Rekli smo da su za vodonik i vodoniku slične atomime, svojstvena stanja energije određena kvantnim brojevima momenta impulsa l , m i m_s . Zato su selekciona pravila za dipolne prelaze zapravo posledica činjenice da je \vec{r} vektorski operator, i mogu se dobiti primenom *Wigner-Eckart-ove teoreme*. Pošto Wigner-Eckart-ovu teoremu nismo eksplicitno formulisali a pominjali smo je samo u najjednostavnijem slučaju skalarnog operatora, selekciona pravila ćemo izvesti eksplicitnim računanjem integrala, koristeći osobine sfernih harmonika.

Matrični element koji nam je bitan je

$$\langle n l m m_s | x_i | n' l' m' m'_s \rangle \quad (7.114)$$

gde su $x_i = x, y, z$. Da li je (7.114) nula ili nije zavisice, kao i kod Stark-ovog efekta, od integracije po sfernim uglovima θ i φ . Pošto interakcija ne zavisi od spina zaključujemo odmah da je

$$\langle n l m m_s | x_i | n' l' m' m'_s \rangle \sim \delta_{m_s m'_s}, \quad (7.115)$$

odnosno da se projekcija spina u dipolnim prelazima ne menja, $\Delta m_s = 0$. Uzimajući dalje u obzir da je

$$z \sim r Y_1^0, \quad x \pm iy \sim r Y_1^{\pm 1}, \quad (7.116)$$

dobijamo da je integral (7.114) proporcionalan sa

$$\langle n l m m_s | x_i | n' l' m' m'_s \rangle \sim \iint \sin\theta d\theta d\varphi Y_l^{m*} Y_l^{m'} Y_1^{0,\pm 1}. \quad (7.117)$$

Pošto je $Y_l^m \sim e^{im\varphi}$, integral po φ nije nula samo kada je $m' - m + (0, \pm 1) = 0$, odnosno za $\Delta m = 0, \pm 1$. Dalje, znajući da je parnost sfernog harmonika Y_l^m jednaka $(-1)^l$, vidimo da je parnost izraza pod integralom $(-1)^{l+l'+1}$, odnosno da je izraz različit od nule samo ako je $\Delta l = l' - l$ neparno. Da bismo sasvim precizirali selekciono pravilo za Δl treba nam razvoj³

$$Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \varphi) Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \varphi) = \sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \sum_{m=-l}^l \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} (-1)^m C_{00,l_0} C_{m_1 m_2, lm} Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (7.118)$$

gde su $C_{m_1 m_2, j m_j}$ Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti (5.144). Iz gornjeg razvoja u specijalnom slučaju $l_1 = l'$, $l_2 = 1$, dobijamo

$$Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) Y_1^{m''}(\theta, \varphi) = \sum_{l=|l'-1|}^{l'+1} \sum_{m=-l}^l \sqrt{\frac{3(l'+1)}{4\pi(2l+1)}} (-1)^m C_{00,l_0} C_{m' m'', lm} Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (7.119)$$

pa zbog ortogonalnosti sfernih harmonika sledi da je (7.117) uvek nula osim za $\Delta l = \pm 1$.

Da sumiramo: za dipolne prelaze u atomima selekciona pravila su

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1, \quad \Delta m_s = 0. \quad (7.120)$$

7.7 Teorija rasejanja

Mnogi su eksperimenti, i u klasičnoj i u kvantnoj fizici a posebno u fizici visokih energija, eksperimenti rasejanja. U takvim merenjima određuje se struktura čestice i osobine interakcija među česticama koje se sudaraju. U tipičnoj eksperimentalnoj postavci imamo upadni snop koji se sudara sa nepokretnom metom i pri tome rasejava, dajući karakterističnu sliku na ekranu ili detektoru⁴. Rezultat se opisuje diferencijalnim i totalnim presekom rasejanja: u nastavku ćemo definisati ove preseke i izračunati ih u dva važna primera iz klasične mehanike, a takođe ćemo identifikovati veličine pomoću kojih se preseki izražavaju u kvantnoj mehanici.

Tipičan problem zadat je na sledeći način. Upadni snop čestica brzine \vec{v}_0 , dobro lokalizovan u poprečnom pravcu, sudara se metom: osim svojom brzinom, upadne čestice karakterišu se dodatnim osobinama kao što su masa, spin, izospin itd. Pošto je brzina konstantna, u klasičnom opisu trajektorije čestica upadnog snopa su u asimptotskoj oblasti prave linije, a u kvantnom, stanje upadnog snopa asimptotski je ravan talas. Metu na kojoj se snop rasejava opisujemo⁵ potencijalom $V(\vec{r})$, to jest, razmatramo teoriju *potencijalnog rasejanja*. To u osnovi znači da pretpostavljamo da je čestica tačkasta tj. da nema unutrašnju strukturu. Pretpostavićemo i da je potencijal *lokalizovan* u oblasti dimenzija a tako važi

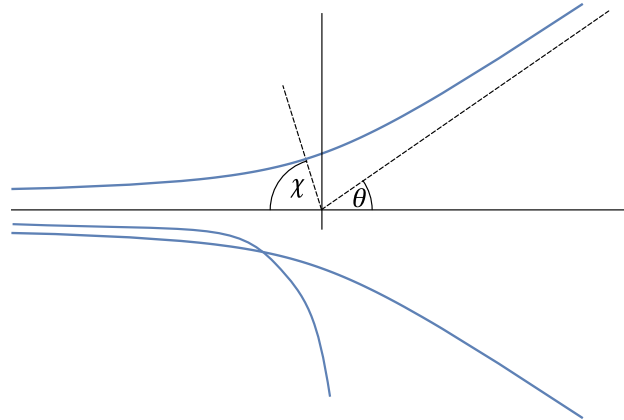
$$V(\vec{r}) \approx 0 \quad \text{za } r > a, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} V(\vec{r}) = 0. \quad (7.121)$$

Pretpostavka o lokalizaciji interakcije znači da su i posle sudara čestice asimptotski slobodne: stanja koja razmatramo su nevezana stanja čestice. Primer ovakve interakcije je Coulomb-ova interakcija, kod koje su klasične trajektorije čestica sa energijom $E > 0$ hiperbole – krive sa dve asimptote, ulaznom (*in*) i izlaznom (*out*).

³ A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North-Holland, 1967.

⁴ Česta konfiguracija u eksperimentu je sudar dva snopa, ali zbog kovarijantnosti uvek možemo da pređemo u referentni sistem u kome čestice jednog snopa miruju.

⁵ U kontekstu činjenice da se problem dva tela može svesti na kretanje efektivne čestice u spoljašnjem potencijalu koji je jednak potencijalu interakcije: razume se, razmatramo nerelativističke čestice.



Slika 7.7: Rasejanje na lokalizovanom potencijalu.

Fluks snopa upadnih čestica je broj čestica N_{in} koje u jedinici vremena prođu kroz jedinični poprečni presek, i to je veličina u odnosu na koju se normiraju izmereni rezultati rasejanja. Klasično, za fluks imamo

$$j_{in} = \frac{dN_{in}}{dS dt} = \frac{dN_{in}}{dS dl} v_0 = \rho v_0, \quad (7.122)$$

gde je ρ gustina. Kvantno, fluks upadnog snopa je fluks verovatnoće (2.44). Diferencijalni presek rasejanja $d\sigma$ definiše se kao broj čestica koje se raseju u prostorni ugao $d\Omega$ u jedinici vremena, normiran na fluks upadnog snopa i broj centara rasejanja N_c :

$$d\sigma = \frac{1}{j_{in} N_c} \frac{dN_{out}}{dt}. \quad (7.123)$$

U poslednjoj formuli je

$$\frac{dN_{out}}{dt} = j_{out} r^2 d\Omega \quad (7.124)$$

jer je površina koja odgovara prostornom uglu $d\Omega$, $dS = r^2 d\Omega$. Diferencijalni presek se zapravo računa i meri u asimptotskoj oblasti, $r \rightarrow \infty$. Pošto imamo jedan centar rasejanja, potencijal $V(\vec{r})$, imamo

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{j_{out} r^2}{j_{in}}. \quad (7.125)$$

Ovaj izraz opisuje rasejanje u tri dimenzije: diferencijalni presek ima dimenzije površine. U jednodimenzionim problemima postoje samo dva ugla rasejanja, 0 i π , a diferencijalni presek se svodi na koeficijente refleksije i transmisije (2.119). Znači, da bi se u kvantnoj mehanici odredio presek rasejanja (7.125) treba identifikovati upadni i izlazni snop, odnosno odgovarajuće talasne funkcije.

Vratimo se, radi kasnijeg poređenja, na klasičnu mehaniku i razmotrimo rasejanje na centralnom potencijalu, $V = V(r)$. Pre sudara, čestice upadnog snopa kreću se pravolinijski i paralelno, a rastojanje između *in*-asimptote svake čestice i centra potencijala je različito: to rastojanje naziva se *parametar sudara*, ρ , i određuje moment impulsa, $L = mv_0\rho$. Trajektorija čestice je funkcija konstanti kretanja, energije E i momenta impulsa L . Kod sferno simetričnog potencijala rasejanje ima aksijalnu simetriju sa osom koja je paralelna pravcu upadnog snopa i prolazi kroz centar potencijala. Broj čestica koje se u jedinici vremena raseju pod uglom θ proporcionalan je površini kružnog prstena između odgovarajućih vrednosti parametara sudara, ρ i $\rho + d\rho$. Ako izraz napišemo za elementarni sferni ugao $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$, imamo

$$d\sigma = \rho d\rho d\varphi = \rho \left| \frac{d\rho}{d(\cos\theta)} \right| |d(\cos\theta)| d\varphi = \frac{\rho}{\sin\theta} \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| d\Omega. \quad (7.126)$$

Iz poslednje jednačine vidi se da je diferencijalni presek određen jednačinom trajektorije, koju smo za sferno simetrične potencijale našli u prvoj glavi, (1.20). Označimo sa χ integral

$$\chi = \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{\frac{L}{mr^2}}{\sqrt{\frac{2}{m} \left(E - V - \frac{L^2}{2mr^2} \right)}} dr, \quad (7.127)$$

odnosno polovinu ugla između upadne i izlazne asimptote: ugao rasejanja θ je $\theta = \pi - 2\chi$. Za rasejanje elektrona na Coulomb-ovom potencijalu jezgra, $V(r) = -Ze^2/r$, ovaj integral se može eksplicitno izračunati,

$$\chi = \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{\frac{\rho}{r}}{\sqrt{1 - \frac{\rho^2}{r^2} - \frac{2Ze^2}{mv_0^2 r}}} dr = \arccos \frac{\frac{Ze^2}{mv_0^2 \rho}}{\sqrt{1 + \left(\frac{Ze^2}{mv_0^2 \rho} \right)^2}}, \quad (7.128)$$

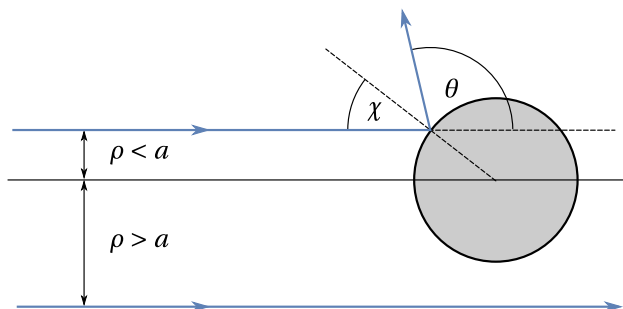
odnosno

$$\rho = \frac{Ze^2}{mv_0^2} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}. \quad (7.129)$$

Prema tome, diferencijalni presek za klasično rasejanje na Coulomb-ovom potencijalu dat je *Rutherford-ovom formulom*

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{4m^2 v_0^4} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (7.130)$$

Još jednostavnija je formula za ugao rasejanja za česticu koja se rasejava na krutoj sferi poluprečnika a . Ukoliko je $\rho > a$, ugao rasejanja je $\theta = 0$. Za $\rho < a$, čestica se rasejava tako da je upadni ugao na normalu na sferu jednak odbojnom uglu: sa slike 7.8 vidimo da je



Slika 7.8: Rasejanje na krutoj sferi.

$$\rho = a \sin \chi = a \cos \frac{\theta}{2}, \quad (7.131)$$

pa se za diferencijalni presek dobija

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{a^2}{4}. \quad (7.132)$$

Totalni presek rasejanja, $\sigma = \int d\sigma$, daje efektivnu površinu na kojoj se snop rasejava. U slučaju krute sfere to je površina poprečnog preseka sfere,

$$\sigma = \pi a^2, \quad (7.133)$$

dok kod Rutherford-ovog rasejanja totalni presek divergira.

7.8 Green-ova funkcija za slobodnu česticu

U kvantnoj mehanici postoje dva načina da se pristupi problemu rasejanja, tj. da se odrede upadno i izlazno stanje čestice odnosno snopa koji se rasejava. Mi ćemo kao najjednostavniji razmatrati tzv. stacionarni pristup: pretpostavićemo da je čestica u stacionarnom stanju (koje je zbir upadnog i izlaznog talasa), koje se dobija rešavanjem stacionarne Schrödinger-ove jednačine. Druga mogućnost je da se verovatnoće prelaza iz početnog, *in*-stanja u krajnja, *out*-stanja dobiju metodom vremenski zavisne perturbacije⁶.

Metod stacionarnog stanja podrazumeva da potencijal ne zavisi od vremena, što znači da je rasejanje elastično tj. da se održava energija. Hamiltonijan čestice je zbir kinetičke i potencijalne energije,

$$H = H_0 + V = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}), \quad (7.134)$$

gde je neperturbovani hamiltonijan kinetička energija, $H_0 = T$, što je u skladu sa uslovom da su asimptotski talasi, upadni i rasejani, stanja slobodne čestice. Rešenje stacionarne Schrödinger-ove jednačine pišemo u obliku

$$\psi = \psi_{in} + \psi_{out}, \quad (7.135)$$

a stanje upadnog snopa ψ_{in} je ravan talas

$$\psi_{in} = \psi^{(0)} = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}, \quad m\vec{v}_0 = \hbar\vec{k}_0. \quad (7.136)$$

Mada za neke potencijale ukupna Schrödinger-ova jednačina

$$H\psi = E\psi, \quad E > 0 \quad (7.137)$$

može da se reši egzaktno, mi ćemo je rešavati približno: za to je potrebno razviti teoriju perturbacija za stanja kontinualnog spektra. Rekli smo, zbog uslova (7.121) pretpostavljamo da je izlazno stanje ψ_{out} u asimptotskoj oblasti stanje slobodne čestice, mada ne nužno ravan talas. Treba naglasiti da je ovo jedna od pretpostavki pod kojima radimo, jer i u klasičnoj i u kvantnoj mehanici moguće je da potencijal žahvati" česticu tj. da ona iz stanja kontinualnog spektra pređe u vezano stanje: takve slučajeve ovde ne razmatramo. Jednačinu (7.137) rešavamo perturbativno, pretpostavljajući da je kinetička energija čestice mnogo veća od potencijalne,

$$E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} > 0, \quad \lambda \sim \frac{|V|}{|H_0|} \ll 1. \quad (7.138)$$

Vrednost energije E je fiksirana, pa perturbativnim računom popravljamo samo talasnu funkciju ψ koju kao i ranije razvijamo u red po malom parametru λ ,

$$\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \dots, \quad (7.139)$$

gde je $\psi^{(0)}$ upadni talas (7.136). Jednačina (7.137) može se prepisati u obliku

$$\Delta\psi + k_0^2\psi = \frac{2mV}{\hbar^2}\psi \equiv U\psi, \quad (7.140)$$

zbog jednostavnosti smo reskalirali potencijal, $U = 2mV/\hbar^2$. Razvijajući u red po stepenima λ dobijamo sistem:

$$\begin{aligned} \Delta\psi^{(0)} + k_0^2\psi^{(0)} &= 0 \\ \Delta\psi^{(1)} + k_0^2\psi^{(1)} &= U\psi^{(0)} \\ \Delta\psi^{(2)} + k_0^2\psi^{(2)} &= U\psi^{(1)} \\ &\dots \end{aligned} \quad (7.141)$$

⁶Na pristupačnom nivou sa mnogo više detalja problemi rasejanja se razmatraju npr. u udžbenicima P. Roman, *Advanced Quantum Theory*, Addison-Wesley, 1965. i A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North-Holland 1967.

Kao i kod perturbacije diskretnog spektra, sistem (7.141) se rešava iterativno. Sve jednačine su istog oblika,

$$(\Delta + k_0^2) \psi^{(n)}(\vec{r}) = J^{(n)}(\vec{r}), \quad (7.142)$$

gde je na desnoj strani "izvor", $J^{(n)}(\vec{r}) = U(\vec{r}) \psi^{(n-1)}(\vec{r})$, koji je u svakoj iteraciji funkcija poznata iz prethodne iteracije.

Jedan od metoda da se jednačine (7.142) reše je metod *Green-ove funkcije*. Intuitivno, metod se svodi na rešavanje analogne jednačine za tačkasti izvor i primenu principa superpozicije. Dakle, umesto (7.142), rešavamo jednačinu⁷

$$(\Delta + k_0^2) G(\vec{r}, \vec{r}') = -\delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (7.143)$$

koja daje Green-ovu funkciju $G(\vec{r}, \vec{r}')$ za stacionarnu Schrödinger-ovu jednačinu za slobodnu česticu. Lako se proverava da su popravke talasne funkcije date sa

$$\psi^{(n)}(\vec{r}) = - \int G(\vec{r}, \vec{r}') J^{(n)}(\vec{r}') d^3 \vec{r}'. \quad (7.144)$$

Pošto ne zavisi eksplicitno od koordinata, (7.143) se rešava razvojem u Fourier-ov integral. Iz translacione invarijantnosti jednačine sledi da je rešenje oblika

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \tilde{G}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d^3 k. \quad (7.145)$$

Koristeći da je $(2\pi)^3 \delta(\vec{r} - \vec{r}') = \int e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d^3 k$, za Fourier-ove komponente $\tilde{G}(\vec{k})$ dobijamo

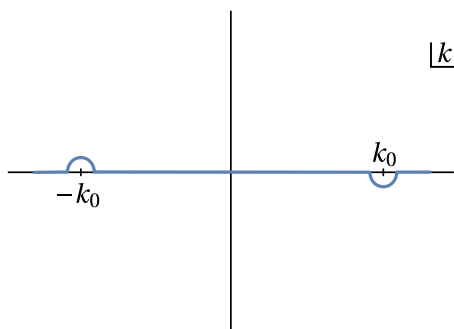
$$\tilde{G}(\vec{k}) = \frac{1}{k^2 - k_0^2}. \quad (7.146)$$

Međutim, kada prethodni izraz zamenimo u prostornu Green-ovu funkciju (7.145), dobijamo divergentan integral koji ima singularitete u $k^2 = k_0^2$, odnosno za vrednosti impulsa koje odgovaraju svojstvenim stanjima neperturbovanog hamiltonijana. To nije neobično: sličnu situaciju smo imali kod prve popravke talasne funkcije diskretnog spektra (7.15), samo što je tamo singularnu tačku bilo jednostavno izbaciti iz sume. Divergenciju eksplicitno vidimo kada integralimo u sfernim koordinatama:

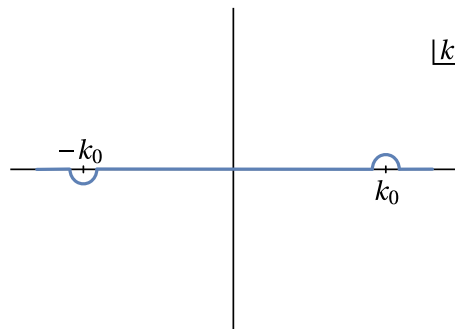
$$\begin{aligned} G(\vec{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{k^2 - k_0^2} d^3 k = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{k^2 - k_0^2} \int_0^\pi e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta \\ &= -\frac{i}{(2\pi)^2} \frac{1}{r} \int_0^\infty \frac{k dk}{k^2 - k_0^2} (e^{ikr} - e^{-ikr}) = -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{ikr}}{k^2 - k_0^2} dk. \end{aligned}$$

Vrednost poslednjeg integrala odnosno način obilaska polova $k = \pm k_0$ i eliminaciju singulariteta zapravo treba definisati, i kao što ćemo videti tu definiciju određuju granični uslovi za zadati problem. Integral se računa primenom Jordan-ove leme, tako što se integral po realnoj osi dopuni integralom po gornjem polukrugu (beskonačnog poluprečnika) i time zatvori kontura integracije u kompleksnoj ravni: rezultat se dobija primenom Cauchy-jeve teoreme o reziduumu. Izbor gornjeg polukruga definisan je zahtevom da je u limesu $k \rightarrow \infty$ integral po dopunskoj polukružnoj konturi nula. U našem integralu je $r > 0$ pa podintegralna funkcija po k eksponencijalno opada u gornjoj poluravni, što obezbeđuje da dopunski integral teži nuli. Ako pretpostavimo da je pol $k = k_0$ pomeren u gornju a pol $k = -k_0$ u donju poluravan kao na slici 7.9, imamo

⁷Znak minus, kao i bilo koji drugi konstantni faktor uz δ -funkciju na desnoj strani, je konvencija.



Slika 7.9: Kontura kod koje je pol $k = k_0$ pomeren u gornju a pol $k = -k_0$ u donju poluravan.



Slika 7.10: Kontura kod koje je pol $k = k_0$ pomeren u donju a pol $k = -k_0$ u gornju poluravan.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikr}}{k^2 - k_0^2} dk = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikr}}{k^2 - k_0^2 + i\epsilon} dk = 2\pi i \frac{e^{ik_0 r}}{2k_0}, \quad (7.147)$$

pa za Green-ovu funkciju dobijamo

$$G^+(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik_0|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (7.148)$$

Suprotan obilazak polova (slika 7.10) daje

$$G^-(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{-ik_0|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (7.149)$$

a ako integral definišemo kao Cauchy-jevu glavnu vrednost odnosno kao poluzbir doprinosa oba pola, dobija se

$$G^1(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{\cos k_0|\vec{r} - \vec{r}'|}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (7.150)$$

Da bismo razumeli razliku između dobijenih Green-ovih funkcija, izračunajmo, koristeći G^+ , prvu popravku talasne funkcije, $\psi^{(1)}$. Pretpostavili smo ranije da je $\psi^{(0)}$ ravan talas (7.136). U prvom redu teorije perturbacija izlazno stanje odnosno rasejani talas je

$$\psi_{out} = \psi^{(1)} = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik_0|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi^{(0)}(\vec{r}') d^3 r'. \quad (7.151)$$

Zanimaju nas osobine ψ_{out} u asimptotskoj oblasti. Pošto je potencijal lokalizovan, $U(\vec{r}') \neq 0$ samo za $|\vec{r}'| \leq a \ll r$, podintegralna funkcija u (7.151) a samim tim i integral će biti različiti od nule samo za male vrednosti r' . Zato sve funkcije možemo da razvijemo u red po parametru r'/r i zadržimo vodeće članove. Iz

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = (r^2 + r'^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{r}')^{1/2} = r \left(1 - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2} + \dots \right) \quad (7.152)$$

dobijamo

$$\psi^{(1)}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik_0 r} e^{-ik_0 \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r}}}{r} \left(1 + \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2} \right) U(\vec{r}') \psi^{(0)}(\vec{r}') d^3 r' \approx -\frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik_0 r}}{r} U(\vec{r}') \psi^{(0)}(\vec{r}') d^3 r',$$

odnosno

$$\psi_{out}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}') d^3r' \quad (7.153)$$

gde smo koristili održanje energije, $k^2 = k_0^2$ i uveli

$$\vec{k} = k_0 \frac{\vec{r}}{r}, \quad \vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_0. \quad (7.154)$$

Formula (7.153) je traženi rezultat koji opisuje rasejanje. Na velikim rastojanjima, ukupna talasna funkcija u prvom redu teorije perturbacija data je sa

$$\psi(\vec{r}) = \psi^{(0)}(\vec{r}) + \psi^{(1)}(\vec{r}) = \psi_{in}(\vec{r}) + \psi_{out}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi). \quad (7.155)$$

To znači da se pri rasejanju upadni ravan talas rasejava kao *izlazni sferni talas* (ne izotropan, nego deformisan funkcijom f) koji se iz centra potencijala širi ka beskonačnosti. *Amplituda rasejanja* $f(\theta, \varphi)$

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int U(\vec{r}') e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'} d^3r' = -2\pi^2 U_{\vec{k}, \vec{k}_0} \quad (7.156)$$

ne zavisi od rastojanja r nego samo od pravca rasejanja \vec{k} , odnosno od uglova θ i φ . Ako sa θ označimo ugao rasejanja, odnosno usmerimo z -osu duž vektora \vec{k}_0 , važi

$$q = |\vec{k} - \vec{k}_0| = 2k \sin \frac{\theta}{2}. \quad (7.157)$$

Slično kao kod perturbacije diskretnog spektra, popravka talasne funkcije zavisi od matricnih elemenata perturbacije

$$U_{\vec{k}, \vec{k}_0} = \langle \vec{k} | U | \vec{k}_0 \rangle, \quad (7.158)$$

u svojstvenom bazu neperturbovanog hamiltonijana tj. u bazu ravnih talasa.

Izraz (7.141) je dobijen korišćenjem Green-ove funkcije G^+ . Da smo koristili funkciju G^- dobili bismo upadni sferni talas koji se iz beskonačnosti sažima ka centru rasejanja: i to je, razume se, takođe rešenje Schrödinger-ove jednačine, ali ne ono koje tražimo kada hoćemo da odredimo efikasni presek rasejanja. Tako se vidi da je izbor Green-ove funkcije odnosno načina obilaska polova zapravo fiksiran graničnim uslovima za zadati problem: na sličan način smo fiksirali konstante u rešenju (2.112) u slučaju jednodimenzionog rasejanja.

Značaj amplitude $f(\theta, \varphi)$ je u tome što daje diferencijalni presek rasejanja. Videli smo da je diferencijalni presek izraz

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{j_{out} r^2}{j_{in}} \quad (7.159)$$

izračunat u asimptotskoj oblasti, za veliko r . U našem slučaju upadni fluks je

$$j_{in} = \frac{\hbar k_0}{m}. \quad (7.160)$$

Za izlazni fluks relevantna je njegova radijalna komponenta. Iz

$$\nabla \psi_{out}|_r = \frac{\partial}{\partial r} \psi_{out} = f(\theta, \varphi) e^{ikr} \left(\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2} \right) \approx \frac{ikf e^{ikr}}{r} \quad (7.161)$$

dobijamo

$$j_{out}|_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f|^2}{r^2} = \frac{\hbar k_0}{m} \frac{|f|^2}{r^2}, \quad (7.162)$$

pa je diferencijalni efikasni presek dat sa

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2. \quad (7.163)$$

Formula (7.156) za amplitudu rasejanja naziva se *Born-ova aproksimacija*. U ovoj aproksimaciji, amplituda rasejanja proporcionalna je Fourier-komponentama potencijala. Detaljnijom analizom uslova pod kojima se dobija, može da se pokaže da je Born-ova aproksimacija primenljiva na *slabe potencijale*, $V \ll \hbar^2/(ma^2)$, i *brze upadne snopove*, $V \ll \hbar^2 k/(ma)$.

Primenimo (7.156) na neke specijalne slučajeve. Kada imamo spor upadni snop $ka \ll 1$ koji se rasejava na sferno simetričnom potencijalu, za amplitudu rasejanja dobijamo

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} V(r) d^3r \approx -\frac{2m}{\hbar^2} \int V(r) r^2 dr. \quad (7.164)$$

Koristili smo da, ako je $ka \approx 0$, onda je i $\vec{q}\cdot\vec{r} \approx 0$ tj. $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \approx 1$: rasejanje je izotropno. Ako, sa druge strane, imamo brz upadni snop, $ka \gg 1$, u podintegralnoj funkciji (7.164) član $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}$ veoma brzo osciluje tj. ima talasnu dužinu koja je mnogo manja od karakterističnog rastojanja promena funkcije $V(\vec{r})$. Zato je rezultat koji se dobija integracijom približno nula (pozitivni i negativni doprinosi u integralu se potiru) svuda, osim u oblasti gde je $\vec{q}\cdot\vec{r} \approx 0$, tj. $\theta \approx 0$. Znači: brzi snopovi se rasejavaju unapred a ugaono širenje snopa je malo.

Kao poslednji primer izračunaćemo efikasni presek rasejanja u Coulomb-ovom potencijalu u Born-ovoj aproksimaciji. Videli smo već da je za potencijal $1/r$ integral (7.156) divergentan: da bismo ga "regularizovali", Coulomb-ov potencijal izrazićemo kao Yukawa-in potencijal

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} e^{-\alpha r}, \quad (7.165)$$

u limesu $\alpha \rightarrow 0$. Amplituda rasejanja je

$$f = \frac{mZe^2}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{-\alpha r}}{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3r = \frac{2mZe^2}{\hbar^2 q} \int_0^\infty \sin qr e^{-\alpha r} dr = \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \frac{1}{q^2 + \alpha^2}.$$

U limesu $\alpha \rightarrow 0$ za efikasni presek se dobija

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 = \frac{m^2 Z^2 e^4}{4k^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}}, \quad (7.166)$$

odnosno, Rutherford-ova formula. Ovo potpuno poklapanje klasičnog i kvantnog rezultata je u stvari posledica pretpostavki uvedenih Born-ovom aproksimacijom.

7.9 Metod parcijalnih talasa

Perturbativni pristup iz prethodnog poglavlja i izraz (7.156) za amplitudu rasejanja zasniavaju se na razvoju talasne funkcije po ravnim talasima $|\vec{k}\rangle$ koji su svojstvena stanja hamiltonijana slobodne čestice. Međutim ovaj hamiltonijan ima i drugi svojstveni bazis: zajednički svojstveni bazis energije i momenta impulsa, jer H_0 je, osim na translacije, invarijantan i na rotacije. Upravo ovaj drugi bazis se koristi za formulaciju i rešavanje problema rasejanja metodom parcijalnih talasa: *parcijalni talasi* su stanja koja imaju dobro definisane vrednosti energije i momenta impulsa, $|E, l, m\rangle$. Metod parcijalnih talasa je komplementaran Born-ovoj aproksimaciji i primenjuje na rasejanje sporih, odnosno snopova male energije.

Da bismo odredili svojstvena stanja slobodne čestice $|E, l, m\rangle$ vrtićemo se na rešavanje radijalnog dela Schrödinger-ove jednačine u sferno simetričnom potencijalu za kontinualni spektar, $E > 0$. Jednačina (4.43) se rešava razdvajanjem promenljivih,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (7.167)$$

gde radijalna funkcija $u = u_{kl}(r)$ zavisi od energije $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ i momenta impulsa l . Smena (7.167) daje radijalnu jednačinu

$$u'' + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u = 0. \quad (7.168)$$

Ispitajmo prvo asimptotiku. U oblasti $r \rightarrow \infty$ drugi član u zagradi je mali, pa jednačina ima trigonometrijska rešenja, $e^{\pm ikr}$. Ukupno rešenje R_{kl} asimptotski je sferni talas,

$$R_{kl}(r) \sim \frac{e^{\pm ikr}}{r}, \quad (7.169)$$

a intenzitet impulsa k je kontinualan kvantni broj. Za $l = 0$ tj. za s -talase ovo rešenje je egzaktno

$$\psi_{E,0,0}^{\pm} = C^{\pm} \frac{e^{\pm ikr}}{r}. \quad (7.170)$$

Funkcije (7.170) divergiraju u koordinatnom početku. Rešenje koje je u celom prostoru regularno je njihova linearna kombinacija, stojeći talas,

$$\psi_{E,0,0} = C \frac{\sin kr}{r}. \quad (7.171)$$

Radialna jednačina (7.168) se može rešiti egzaktno i za sve ostale vrednosti l . Ako uvedemo promenljivu

$$\xi = kr \quad (7.172)$$

jednačina postaje

$$\xi^2 u'' + (\xi^2 - l(l+1))u = 0 \quad (7.173)$$

i svodi se, smenom nepoznate funkcije $u(\xi) = \sqrt{\xi} v(\xi)$, na Bessel-ovu jednačinu

$$\xi^2 v'' + \xi v' + (\xi^2 - \nu^2)v = 0, \quad \nu = l + \frac{1}{2}. \quad (7.174)$$

Rešenja $u(\xi)$ su *sferne Bessel-ove funkcije*

$$u(\xi) = \xi j_l(\xi), \quad \xi y_l(\xi) \quad (7.175)$$

koje su za celobrojno l

$$j_l(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2\xi}} J_{l+\frac{1}{2}}(\xi), \quad y_l(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2\xi}} Y_{l+\frac{1}{2}}(\xi). \quad (7.176)$$

Najvažnije osobine Bessel-ovih funkcija date su u dodatku ove glave. Ukupno rešenje za slobodnu česticu zove se *parcijalni talas*, i karakteriše se radijalnom funkcijom

$$R_{kl}(r) = c_l j_l(kr) - b_l y_l(kr). \quad (7.177)$$

Koeficijenti b_l i c_l u (7.177) se standardno normiraju na jedinicu, $b_l^2 + c_l^2 = 1$, odnosno

$$c_l = \cos \delta_l, \quad b_l = \sin \delta_l, \quad (7.178)$$

a veličina δ_l naziva se *fazni pomak*. Iz jednakosti

$$j_0(kr) = \frac{\sin kr}{kr}, \quad y_0(kr) = -\frac{\cos kr}{kr} \quad (7.179)$$

vidimo da j_0 odgovara regularnom rešenju (7.171). Analizirajući ponašanje ostalih Bessel-ovih funkcija u nuli,

$$r \rightarrow 0: \quad j_l(kr) \sim (kr)^l, \quad y_l(kr) \sim (kr)^{-l-1} \quad (7.180)$$

vidi se da i za proizvoljne vrednosti l , j_l odgovara regularnom rešenju a y_l singularnom: regularno rešenje za slobodnu česticu dato je uslovom $b_l = 0$ odnosno $\delta_l = 0$. U asimptotskoj oblasti $r \rightarrow \infty$ Bessel-ove funkcije svode se na trigonometrijske,

$$r \rightarrow \infty: \quad j_l(kr) \approx \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right), \quad y_l(kr) \approx -\frac{1}{kr} \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right). \quad (7.181)$$

Funkcije j_l su normirane na δ -funkciju

$$\int_0^{\infty} j_l(kr) j_l(k'r) r^2 dr = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k - k'), \quad (7.182)$$

a opšte rešenje za slobodnu česticu energije E je

$$\psi = \sum_{l,m} a_{lm}(k) R_{kl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (7.183)$$

U prisustvu spoljašnjeg potencijala parcijalni talasi su rešenja samo u asimptotskoj oblasti, i pošto nemamo uslove regularnosti u nuli (u nuli (7.177) nije rešenje), u principu imamo oba sabirka, j_l i y_l . Ali i u tom slučaju rešenja su normirana na δ -funkciju: naime, iz osobina Bessel-ovih funkcija vidi se da se za $kr > l(l+1)$, radijalna funkcija (7.177) ponaša kao

$$\frac{u_{kl}(r)}{r} \approx \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{kr}. \quad (7.184)$$

Za normiranje ove funkcije nije bitan njen tačan oblik u konačnom intervalu $kr \in (0, l(l+1))$ jer je taj doprinos mali, pa važi formula analogna sa (7.182),

$$\int_0^{\infty} u_{kl}^*(r) u_{k'l}(r) dr = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k - k'). \quad (7.185)$$

Da bismo bolje razumeli svojstveni bazis parcijalnih talasa, razvićemo po njemu ravan talas: taj razvoj trebaće nam kasnije. Posmatrajmo ravan talas usmeren duž z -ose

$$\psi_{in} = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} = e^{ikz}. \quad (7.186)$$

Pošto ψ_{in} ne zavisi od ugla φ , u razvoju (7.183) nemamo sabirke po svim sfernim harmonicima nego samo po Y_l^0 :

$$\psi_{in} = \sum_l a_{l,in} R_{kl}(r) P_l(\cos\theta). \quad (7.187)$$

Koeficijente $a_{l,in}$ možemo da odredimo upoređivanjem (7.186) i (7.183) u tački $r = \infty$. Iz (7.184) dobijamo

$$e^{ikz} \approx \sum_l a_{l,in} \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_{l,in})}{kr} P_l(\cos\theta). \quad (7.188)$$

Formula za razvoj ravnog talasa po Legendre-ovim polinomima sa kojom treba da uporedimo (7.188) data je u dodatku: u asimptotskoj oblasti ona daje

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} \approx \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} P_l(\cos \theta), \quad (7.189)$$

pa je

$$\delta_{l,in} = 0, \quad a_{l,in} = i^l (2l+1). \quad (7.190)$$

Primenimo sada razvoj po parcijalnim talasima na talasnu funkciju koja se dobija rasejanjem na potencijalu (7.155),

$$\psi = \psi_{in} + \psi_{out} = e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi). \quad (7.191)$$

U najvažnijem slučaju sferno simetričnog potencijala $V = V(r)$ rasejanje je aksijalno simetrično i amplituda ne zavisi od ugla φ ,

$$f(\theta, \varphi) = f(\theta). \quad (7.192)$$

Zbog toga je, kao malopre

$$\psi = \sum_l a_l R_{kl}(r) P_l(\cos \theta). \quad (7.193)$$

U asimptotskoj oblasti iz (7.184) imamo

$$\begin{aligned} \psi &\approx \sum_l a_l \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{kr} P_l(\cos \theta) \\ &= \frac{e^{ikr}}{r} \sum_l a_l \frac{(-i)^l e^{i\delta_l}}{2ik} P_l(\cos \theta) - \frac{e^{-ikr}}{r} \sum_l a_l \frac{(-i)^l e^{-i\delta_l}}{2ik} P_l(\cos \theta), \end{aligned} \quad (7.194)$$

pri čemu je

$$\psi_{in} \approx \frac{e^{ikr}}{r} \sum_l \frac{2l+1}{2ik} P_l(\cos \theta) - \frac{e^{-ikr}}{r} \sum_l \frac{(-1)^l (2l+1)}{2ik} P_l(\cos \theta), \quad (7.195)$$

$$\psi_{out} \approx \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta). \quad (7.196)$$

Izjednačavanjem članova uz upadni talas dobijaju se koeficijenti a_l ,

$$a_l = i^l (2l+1) e^{i\delta_l}, \quad (7.197)$$

tj. pri rasejanju parcijalni talasi se "fazno pomiču"; često se uz fazni pomak δ_l uvodi i veličina $S_l = e^{2i\delta_l}$. Upoređivanjem članova uz izlazni talas dobijamo amplitudu rasejanja,

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_l \frac{1}{2i} (2l+1)(S_l - 1) P_l(\cos \theta) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta). \quad (7.198)$$

Videli smo da amplituda rasejanja daje efikasni presek,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2. \quad (7.199)$$

Za rasejanje u sferno-simetričnom potencijalu, efikasni presek je određen faznim pomacima δ_l koji zavise od oblika potencijala V . Integracijom po uglovima, iz (7.198) dobija se totalni presek rasejanja,

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin\theta d\theta. \quad (7.200)$$

Koristeći ortogonalnost Legendre-ovih polinoma (4.116) za totalni presek se dobija

$$\sigma = \sum_l \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (7.201)$$

Sabirci σ_l u poslednjem izrazu nazivaju se *parcijalne širine rasejanja*. Jedna od neposrednih posledica izraza (7.198) i (7.201) je *optička teorema*:⁸

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0). \quad (7.202)$$

Ova teorema je veoma značajna i važi i opštijem slučaju. Približnim računom u čije detalje nećemo ulaziti⁹ za fazne pomake se približno dobija

$$\tan \delta_l \approx -k \int_0^\infty j_l^2(kr) V(r) r^2 dr. \quad (7.203)$$

Ukoliko je impuls k mali, sferne Bessel-ove funkcije $j_l(kr)$ možemo da aproksimiramo njihovom vrednošću u okolini nule

$$j_l(kr) \approx \frac{l!(2kr)^l}{(2l+1)!}, \quad (7.204)$$

pa za fazne pomake imamo

$$\tan \delta_l \approx -\frac{2^{2l}(l!)^2}{(2l+1)!^2} k^{2l+1} \int_0^\infty V(r) r^{2l+2} dr, \quad (7.205)$$

odnosno

$$\delta_l \sim k^{2l+1}. \quad (7.206)$$

To znači da pri malim energijama doprinos preseku rasejanja daju samo parcijalni talasi malih ugaonih momenata, a najveći doprinos je σ_0 . Ovo je u skladu sa klasičnom slikom rasejanja: klasično, vrednost momenta impulsa je $L = \hbar k_0 \rho$, a čestice koje imaju velike vrednosti l odnosno velike parametre sudara ρ pri rasejanju ne skreću mnogo, te je njihov doprinos preseku rasejanja zanemarljiv.

Izračunajmo, kao primer, parcijalnu širinu σ_0 za rasejanje na krutoj sferi poluprečnika a . Potencijal je dat sa

$$V(r) = \begin{cases} \infty, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}. \quad (7.207)$$

Rešenje radijalnog dela Schrödinger-ove ove jednačine je (7.177),

$$u_{kl}(r) = \begin{cases} 0, & r < a \\ \cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l y_l(kr), & r > a \end{cases} \quad (7.208)$$

⁸Za njeno izvođenje treba iskoristiti relaciju $P_l(1) = 1$.

⁹Pogledati npr. S. Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, 2012.

uz granični uslov

$$u_{kl}(a) = 0. \quad (7.209)$$

Ovaj granični uslov određuje fazne pomake: zamenujući (7.209) u (7.208) dobijamo

$$\tan \delta_l = \frac{j_l(ka)}{y_l(ka)}. \quad (7.210)$$

Specijalno, za s -talase se dobija

$$\delta_0 = -ka \quad (7.211)$$

pa je odgovarajuća parcijalna širina rasejanja data sa

$$\sigma_0 = 4\pi a^2 \left(\frac{\sin ka}{ka} \right)^2. \quad (7.212)$$

Odavde vidimo da je za male vrednosti impulsa k totalni presek rasejanja

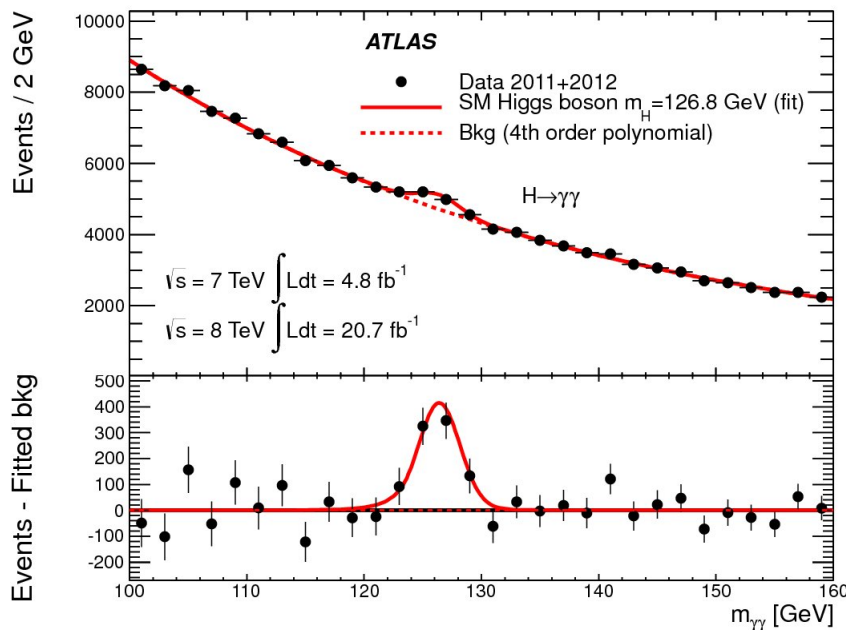
$$\sigma \approx \sigma_0 = 4\pi a^2. \quad (7.213)$$

Može se pokazati da za velike impulse važi

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sigma = 2\pi a^2. \quad (7.214)$$

Dobijeni presek rasejanja je nekoliko puta veći od klasičnog zbog efekata difrakcije talasa koji opisuje kvantnu česticu.

7.10 Rezonance



Slika 7.11: Presek rasejanja za Higgs-ov bozon, rezultati za kanal $H \rightarrow \gamma\gamma$

Jedna od karakterističnih pojava pri sudarima čestica je pojava dugoživećih stanja ili kvazidiskretnih nivoa energije, takozvanih *rezonanci*¹⁰. Rezonance imaju specifičan oblik preseka

¹⁰Rezultati preseka rasejanja za Higgs-ov bozon preuzeti su sa <http://www.atlasexperiment.org/HiggsResources/>

rasejanja $\sigma(E)$, karakterističan i za linije u spektrima atoma i molekula: lorencijan. U ovom poglavlju izvešćemo odgovarajuću formulu za presek rasejanja, Breit-Wigner-ovu formulu (7.230), za rasejanje na odbojnoj sferno simetričnoj potencijalnoj barijeri oblika δ -funkcije sledeći u osnovi primer dat u zbirci Galitski-og, Karnakov-a i Kogan-a¹¹. Preciznija izvođenja data npr. u udžbenicima Landau-a ili Weinberg-a zahtevaju naprednije metode analitičkog produženja u primeni WKB aproksimacije: mi se zato zadržavamo na najjednostavnijem modelu.

Polazimo od potencijala

$$V(r) = V_0 \delta(r - a) \quad (7.215)$$

koji opisuje potencijalnu energiju relativne čestice u sudaru. Videli smo da za male vrednosti kinetičke energije dominantni doprinos preseku rasejanja daje parcijalna širina σ_0 , pa ćemo radijalnu Schrödinger-ovu jednačinu rešavati samo za s -stanja, $l = 0$. Pošto je potencijal oblika δ -funkcije, rešavamo zapravo jednačinu za slobodnu česticu u dve oblasti, $0 < r < a$ i $r > a$, a određivanje stacionarnih stanja se svodi se glatko spajanje rešenja u $r = a$. Stanja nultog momenta impulsa, $\psi_{E,0,0}$ su

$$\psi_{E,0,0} = \frac{u}{r} Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{u(r)}{r}, \quad (7.216)$$

gde $u(r)$ zadovoljava

$$u'' + k^2 u = \alpha \delta(r - a) u \quad (7.217)$$

pri čemu smo označili

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \alpha = \frac{2mV_0}{\hbar^2}. \quad (7.218)$$

U obe oblasti, $r < a$ i $r > a$, $u(r)$ je linearna kombinacija ravnih talasa: pri tome, da bi bila konačna, talasna funkcija za $r < a$ se u koordinatnom početku ponaša kao $u(r) \sim \sin kr$. Prema tome svojstvena stanja su oblika

$$\frac{u(r)}{r} = \begin{cases} \frac{A}{r} \sin kr, & r < a, \\ \frac{e^{i\delta_0}}{r} (e^{ikr+i\delta_0} - e^{-ikr-i\delta_0}) = S_0 \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r}, & r > a \end{cases}$$

uz odgovarajući izbor konstanti. Uslovi neprekidnosti u tački a

$$u(a+\epsilon) - u(a-\epsilon) = 0, \quad u'(a+\epsilon) - u'(a-\epsilon) = \alpha u(a) \quad (7.219)$$

daju

$$A = e^{i\delta_0} \frac{e^{ika+i\delta_0} - e^{-ika-i\delta_0}}{\sin ka}, \quad (7.220)$$

$$S_0 = e^{2i\delta_0} = e^{-2ika} \frac{\alpha a \sin ka + k a \cos ka + i k a \sin ka}{\alpha a \sin ka + k a \cos ka - i k a \sin ka}.$$

Razmatraćemo slučaj jake veze i malih upadnih brzina, $ka/\alpha a \ll 1$. Za fazni pomak se u tom slučaju dobija

$$S_0 = e^{-2ika} \frac{\sin ka + \frac{ka}{\alpha a} e^{ika}}{\sin ka + \frac{ka}{\alpha a} e^{-ika}} \approx e^{-2ika}, \quad (7.221)$$

¹¹V. Galitski, B. Karnakov and V. Kogan, *Exploring Quantum Mechanics*, Oxford University Press, 2013.

odnosno $\delta_0 = -ka$ kao kod rasejanja na krutoj sferi, što je zbog sličnosti potencijala i logično. Izuzetak u kom gornja aproksimacija ne važi je oblast u kojoj su oba člana u brojiocu (i imeniocu) mala i istog reda veličine:

$$\sin ka \approx \gamma \approx \frac{ka}{\alpha a}, \quad ka = n\pi + \gamma. \quad (7.222)$$

Vrednosti $ka = n\pi$ odgovaraju energijama stojećih talasa u beskonačno dubokoj potencijalnoj jami širine a i nazivaju se *rezonance*. Razmotrimo detaljnije efikasni presek za vrednosti energije u okolini rezonanci (7.222). Izražena do prvog reda po γ energija je

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \left(1 + \frac{2\gamma}{n\pi}\right). \quad (7.223)$$

Zavisnost faznog pomaka i parcijalne širine od energije možemo da odredimo prateći γ u razvoju S_0 , i koristeći vezu (7.223). Imamo

$$\alpha a \sin ka + ka \cos ka \approx (-1)^n (\alpha a \gamma + n\pi + \gamma); \quad (7.224)$$

prva dva sabirka su istog reda veličine, treći možemo da zanemarimo. Izražena preko energije, poslednja relacija se može zapisati kao

$$\alpha a \sin ka + ka \cos ka \approx (-1)^n \alpha a \frac{ma^2}{\hbar^2 n\pi} (E - E_{n,0}) \quad (7.225)$$

kada uvedemo

$$E_{n,0} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2}{\alpha a}\right). \quad (7.226)$$

Imaginarni deo u razlomku (7.221) je, sa istom tačnošću,

$$ka \sin ka \approx (-1)^n n\pi\gamma = (-1)^n \alpha a \frac{ma^2}{\hbar^2 n\pi} \frac{\Gamma_n}{2} \quad (7.227)$$

gde je

$$\Gamma_n = \frac{2\hbar^2 n^2 \pi^2}{ma^2} \frac{\gamma}{\alpha a} \sim \frac{2\hbar^2 n^2 \pi^2}{ma^2} \frac{n\pi}{(\alpha a)^2} \ll E_{n,0}. \quad (7.228)$$

Ukupno, S_0 je

$$S_0 = e^{-2ika} \frac{E - E_{n,0} - \Gamma_n/2}{E - E_{n,0} + \Gamma_n/2}, \quad (7.229)$$

a parcijalni presek rasejanja $\sigma_0(E)$ u okolini n -te rezonance dat je *Breit-Wigner-ovom formulom*

$$\sigma_0(E) = 4\pi \frac{|S_0 - 1|^2}{4k^2} = \frac{\pi a^2}{n^2 \pi^2} \frac{\Gamma_n^2}{(E - E_{n,0})^2 + \Gamma_n^2/4}. \quad (7.230)$$

7.11 Dodatak

Bessel-ove funkcije

BESSEL-OVE FUNKCIJE su rešenja jednačine

$$x^2 y'' + x y' + (x^2 - \nu^2) y = 0, \quad \nu \in \mathbb{C}. \quad (7.231)$$

RAZVOJ U RED:

$$J_\nu = \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(\nu + m + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m}, \quad \nu \neq -n \in \mathbb{N}. \quad (7.232)$$

Za celobrojno n , J_n i J_{-n} nisu linearno nezavisne pošto važi

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x), \quad (7.233)$$

NEUMANN-OVE FUNKCIJE su linearno nezavisno rešenje Besselove jednačine

$$Y_\nu(x) = \frac{\cos \nu \pi J_\nu(x) - J_{-\nu}(x)}{\sin \nu \pi}, \quad Y_n(x) = \lim_{\nu \rightarrow n} Y_\nu(x). \quad (7.234)$$

SPECIJALNE VREDNOSTI:

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{ix \cos \theta} d\theta. \quad (7.235)$$

FUNKCIJA GENERATRISA:

$$e^{\frac{x}{2}(z - \frac{1}{z})} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n(x) z^n. \quad (7.236)$$

REKURENTNE RELACIJE:

$$J_{n-1}(x) + J_{n+1}(x) = \frac{2n}{x} J_n'(x), \quad J_{n-1}(x) - J_{n+1}(x) = 2J_n(x) \quad (7.237)$$

RAZVOJ U RED: Bessel-ove funkcije $J_n(x)$ imaju beskonačno mnogo nula i svaka od njih liči na trigonometrijske funkcije, sinus ili kosinus. Na primer, postoji analogon razvoja u Fourier-ov red

$$f(x) = \sum_n a_j \sin(n\pi x) \quad (7.238)$$

koji važi za sve funkcije $f(x)$ definisane na intervalu $x \in (0, 1)$, $f(0) = 0$, $f(1) = 0$. Ako se sa $c_{n\nu}$ označi n -ta nula funkcije $J_\nu(x)$,

$$J_\nu(c_{n\nu}) = 0, \quad (7.239)$$

važi

$$f(x) = \sum_n a_n J_\nu(c_{n\nu} x), \quad (7.240)$$

za funkcije definisane na intervalu $x \in (0, 1)$, $f(1) = 0$. Koficijenti se dobijaju inverznom formulom

$$a_n = \frac{2}{J_\nu'^2(c_{n\nu})} \int_0^1 x f(x) J_\nu(c_{n\nu} x) dx. \quad (7.241)$$

RELACIJE ORTOGONALNOSTI: Neka su $c_{m\nu}$ $c_{n\nu}$ dve različite nule funkcije $J_\nu(x)$. Važi relacija

$$\int_0^1 x J_\nu(c_{m\nu} x) J_\nu(c_{n\nu} x) dx = 0. \quad (7.242)$$

U kontinualnom limesu

$$\int_0^{\infty} x J_\nu(kx) J_\nu(k'x) dx = \frac{1}{k} \delta(k - k'), \quad \nu > -\frac{1}{2}. \quad (7.243)$$

ASIMPTOTIKA:

$$\begin{aligned} x \rightarrow 0: \quad J_n(x) &\approx \frac{x^n}{2^n n!}, \\ x \rightarrow \infty: \quad J_n(x) &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right). \end{aligned} \quad (7.244)$$

ADICIONE FORMULE:

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n(x) = 1, \quad J_n(x+y) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} J_k(x) J_{n-k}(y). \quad (7.245)$$

Sferne Bessel-ove funkcije

SFERNE BESSEL-OVE FUNKCIJE se mogu dobiti iz rešenja Bessel-ove jednačine za specijalne vrednosti parametra $\nu = l + \frac{1}{2}$. Uvođenjem smene $y(x) = \sqrt{x} j(x)$ Bessel-ova jednačina postaje

$$x^2 j'' + 2x j' + (x^2 - l(l+1))j = 0 \quad (7.246)$$

i njena rešenja su sferne Bessel-ove funkcije

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}(x), \quad y_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} Y_{l+\frac{1}{2}}(x). \quad (7.247)$$

Sferne Bessel-ove funkcije se izražavaju preko elementarnih funkcija:

$$j_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin x}{x}, \quad y_l(x) = -(-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^l \frac{\cos x}{x}. \quad (7.248)$$

SPECIJALNE VREDNOSTI:

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad y_0(x) = -\frac{\cos x}{x}. \quad (7.249)$$

REKURENTNE RELACIJE:

$$j_{l+1}(x) = \frac{l}{x} j_l(x) - j'_l(x). \quad (7.250)$$

RELACIJE ORTOGONALNOSTI:

$$\int_0^{\infty} j_l(kx) j_l(k'x) x^2 dx = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k - k'). \quad (7.251)$$

ASIMPTOTIKA:

$$\begin{aligned} x \rightarrow 0: \quad j_l(x) &\approx \frac{2^l l!}{(2l+1)!} x^l, \quad y_l(x) \approx -\frac{(2l)!}{2^l l!} \frac{1}{x^{l+1}}, \\ x \rightarrow \infty: \quad j_l(x) &\approx \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{l\pi}{2}\right), \quad y_l(x) \approx -\frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{l\pi}{2}\right). \end{aligned}$$

POSEBNE FORMULE:

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta), \quad (7.252)$$

a ako su θ , φ i θ' , φ' polarni uglovi vektora \vec{r} i \vec{k} onda je

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l 4\pi i^l j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^{m*}(\theta', \varphi'). \quad (7.253)$$

7.12 Zadaci

7.1 Odrediti numeričko rešenje stacionarne Schrödinger-ove jednačine za jednodimenzioni harmonijski oscilator za osnovno i prvo pobuđeno stanje. Uporediti numeričko rešenje sa analitičkim rešenjem. Šta je problem sa ovim načinom određivanja rešenja?

7.2 Na česticu koja je slobodna između beskonačnih zidova u $x = 0$ i $x = a$ deluje perturbacija $V' = V_0$ ako je $x \in (l, l + d)$ a nula inače (pri tome je $l \in (0, a - d)$ tako da se perturbacija može nalaziti bilo gde u jami). Odrediti popravke na energije i svojstvena stanja u prvom redu računa perturbacije.

7.3 Dve čestice masa m_1 i m_2 kreću se duž x -ose. Sistem je opisan hamiltonijanom

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} - \alpha_1 \delta(x_1) - \alpha_2 \delta(x_2) + \lambda \delta(x_1 - x_2),$$

gde su α_i ($i = 1, 2$) poznati, pozitivni parametri. Uzimajući da je λ perturbacioni parametar odrediti u prvom redu teorije perturbacije energiju osnovnog stanja.

7.4 Čestica mase m kreće se u jednodimenzionom potencijalu

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \sin \frac{2\pi x}{a}, & x \in (0, a) \\ \infty, & x \notin (0, a) \end{cases}.$$

Ovde je V_0 karakteristična energija koja je mnogo manja od energije osnovnog stanja čestice između beskonačnih zidova postavljenih u $x = 0$ i $x = a$. Odrediti prvu nenultu popravku svojstvenih energija ovog sistema.

7.5 Čestica mase m se nalazi u dvodimenzionoj oblasti u kojoj je potencijalna energija data sa

$$V(x, y) = \begin{cases} \frac{\lambda \hbar^2 \pi^2}{m} \delta(x - \frac{a}{2}) \delta(y - \frac{a}{3}), & x \in (0, a) \wedge y \in (0, a) \\ \infty, & x \notin (0, a) \vee y \notin (0, a) \end{cases},$$

gde je λ perturbacioni parametar. U prvom redu računa perturbacije odrediti korekcije energije osnovnog i prvog pobuđenog nivoa.

7.6 Na jednodimenzioni harmonijski oscilator

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

deluje perturbacija $V = \lambda x$.

- Izračunati popravke energije n -tog nivoa u prvom i drugom redu teorije perturbacije.
- Pokazati da se isti rezultat može dobiti i bez korišćenja teorije perturbacije, egzaktnim rešavanjem svojstvenog problema ukupnog hamiltonijana $H = H_0 + V$.

7.7 U blizini ravnotežnog položaja $x = 0$ proizvoljnog potencijala kretanje sistema je opisano harmonijskim oscilatorom mase m i frekvence ω na koji deluje perturbacija

$$V = Ax^3 + Bx^4,$$

Ovde su A i B konstante koje predstavljaju prve netrivialne članov u Taylor-ovom razvoju potencijalne energije oko ravnotežnog položaja. Ovaj približan metod se zove *aproksimacija anharmoniciteta*.

- a) Naći pomeranje energije n -tog stanja u prvom i drugom redu teorije perturbacije.
 b) Odrediti koeficijente ω^2 , A i B za Morse-ov potencijal, definisan u zadatku 1.21.

7.8 Na dvodimenzioni izotropni harmonijski oscilator mase m i sopstvene frekvence ω deluje perturbacija $V = \alpha xy$, gde je α konstanta.

- a) Izračunati razdvajanje prvog pobuđenog nivoa u prvom redu računa perturbacije i odrediti odgovarajuća svojstvena stanja.
 b) Naći razdvajanje drugog pobuđenog nivoa.

7.9 Odrediti prvu popravku osnovnog stanja elektrona u atomu vodonika u slabom električnom polju \vec{E} . Na osnovu dobijenog rezultata, naći drugu popravku osnovnog stanja.

7.10 Naelektisana čestica mase m i naelektrisanja q nalazi se u polju ekraniranog potencijala.

$$U(r) = \begin{cases} -\frac{q^2}{r}, & r < a_0 \\ -\frac{q^2}{r} e^{-\lambda(r-a_0)}, & r > a_0 \end{cases}.$$

Ovde je λ konstanta ekraniranja. Uzimajući da je ova konstanta mala odrediti korekciju energije osnovnog stanja u prvom redu teorije perturbacije.

7.11 U modelu atoma vodonika opisanom u delu 4.3, jezgro se posmatra kao tačkasti izvor naelektrisanja. Ispitati u prvom redu teorije perturbacija pomeranje energija osnovnog stanja atoma vodonika pretpostavljajući da je jezgro lopta poluprečnika b unutar koje je naelektrisanje $-Ze$ raspoređeno zapreminski ravnomerno.

7.12 Kruti rotator momenta inercije I rotira u ravni koja je normalna na z -osu. Na njega deluje perturbacija $V = \lambda \sin(\varphi/2)$, gde je φ azimutalni ugao u cilindričnim koordinatama. Odrediti promenu energije svojstvenih stanja krutog rotatora.

7.13 Uzimajući za probnu funkciju $\psi_a(x) = Ce^{-ax^2}$ naći energiju osnovnog stanja za jednodimenzioni

- a) harmonijski oscilator čija je potencijalna energija $U = m\omega^2 x^2/2$;
 b) anharmonijski oscilator s potencijalnom energijom $U = m^2\omega^3 x^4/(6\hbar)$.

Ovde je C normalizaciona konstanta i a varijacioni parametar.

7.14 Odrediti energiju prvog pobuđenog stanja harmonijskog oscilatora mase m i sopstvene frekvencije ω koristeći probne funkcije

a) $\psi_a(x) = Cxe^{-ax^2}$,

b)
$$\psi_b(x) = \begin{cases} -\frac{K}{b}x - 2K, & x \in (-2b, -b) \\ \frac{K}{b}x, & x \in (-b, b) \\ -\frac{K}{b}x + 2K, & x \in (b, 2b) \\ 0, & x \notin (-2b, 2b) \end{cases},$$

Ovde su a odnosno b varijacioni parametri dok su C i K normalizacione konstante. Uporediti dobijene rezultate.

7.15 Razmotriti jednodimenzionu česticu mase m čije kretanje je opisano hamiltonijanom

$$H = \frac{p^2}{2m} - \rho\delta(x) + \beta|x|.$$

Ovde su ρ i β dve pozitivne konstante interakcije. U slučaju $\beta = 0$ naći energiju osnovnog stanja koristeći probne funkcije oblika $\psi_\lambda = Ne^{-\lambda|x|}$, gde je λ varijacioni parametar. Potom, koristeći istu familiju probnih funkcija, naći energiju osnovnog stanja kada je $\beta > 0$ (uzeti da je β malo). U kakvom su odnosu energije osnovnih stanja u ova dva slučaja?

7.16 Koristeći probne funkcije oblika $\psi_\beta(r) = Ce^{-\beta r}$ naći granicu za energiju osnovnog stanja atoma vodonika.

7.17 Varijacionim metodom proceniti energije osnovnog stanja čestice mase m ako se ona nalazi u polju

- a) harmonijskog oscilatora frekvencije ω uzimajući probne funkcije oblika $\psi_\lambda = Ne^{-\lambda|x|}$;
- b) privlačne delta funkcije $U(x) = -\rho\delta(x)$ koristeći probne funkcije $\psi_a = Ce^{-ax^2}$.

Uporediti dobijene procene sa tačnim rešenjima.

7.18 Hamiltonijan koji opisuje kretanje dva elektrona u atomu helijuma je

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}.$$

Uzimajući normirane probne funkcije

$$\psi_\zeta(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\zeta^3}{\pi a_0^3} e^{-\frac{\zeta}{a_0}(r_1+r_2)},$$

gde je ζ varijacioni parametar odrediti energiju osnovnog stanja, odnosno minimalnu vrednost očekivane vrednosti hamiltonijana.

7.19 Atom vodonika je u osnovnom stanju. U trenutku $t = 0$ uključi se vremenski zavisno električno polje

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{-t/\tau},$$

gde je τ poznata konstanta. Smatrajući ovo polje perturbacijom, odrediti verovatnoću da se posle vremena t atom nađe u prvom pobuđenom stanju. Kolika je ta verovatnoća kada je $t \gg \tau$?

7.20 Na jednodimenzionu česticu koja se nalazi u beskonačno dubokoj potencijalnoj jami između $x = -a$ i $x = a$ deluje vremenski zavisna perturbacija

$$V(x, t) = -\frac{Cx}{1 + \frac{t^2}{\tau^2}}.$$

Ovde su C i τ konstante odgovarajućih dimenzija. Odrediti verovatnoću prelaza iz osnovnog stanja u trenutku $t = -\infty$ u n -to svojstveno stanju u trenutku $t = \infty$.

7.21 Harmonijski oscilator mase m , sopstvene frekvencije ω i naelektrisanja e , nalazi se u homogenom električnom polju

$$E = E_0 e^{-t^2/\tau^2}.$$

Kolika je verovatnoća da sistem koji se u $t = -\infty$ nalazi u k -tom svojstvenom stanju, u trenutku $t = \infty$ bude u n -tom svojstvenom stanju?

7.22 Pokazati da je u polju monohromatskog talasa (opisanog jednačinom (7.105)) odnos potencijalnih energija V_B/V_E reda veličine $p/(mc)$. Ovde su V_B energija magnetnog dipola, V_E energija električnog dipola elektrona, p je impuls elektrona i m njegova masa.

7.23 Pokazati da je propagator konzervativnog sistema čiji hamiltonijan H ima diskretan spektar, ($H|n\rangle = E_n|n\rangle$), gde su $\langle \vec{r}|n\rangle = \psi_n(\vec{r})$) jednak

$$G(t; t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') \sum_n |n, t\rangle \langle n, t'|,$$

odnosno

$$G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t')} \psi_n(\vec{r}) \psi_n^*(\vec{r}'),$$

gde je $\theta(t - t')$ Heaviside-ova step-funkcija.

7.24 Pokazati da je za konzervativni sistem moguće dobiti Green-ovu funkciju za stacionarnu Schrödinger-ovu jednačinu iz vremenske Green-ove funkcije (propagatora).

7.25* Koristeći izraz dat u prethodnom zadatku i Kapteyn-ovu formulu

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(u) H_n(v)}{2^n n!} z^n = \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} e^{\frac{2uvz - (u^2+v^2)z^2}{1-z^2}}, \quad 0 < z < 1,$$

pokazati da je Green-ova funkcija za jednodimenzioni harmonijski oscilator u parametarskoj formi data izrazom (Mehler-ov kernel)

$$G(x; y) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\omega\pi\hbar}} \int_0^{\infty} d\alpha \frac{1}{\sqrt{\text{sh } \alpha}} e^{-\frac{m\omega}{4\hbar} ((x+y)^2 \text{th}^2 \frac{\alpha}{2} + (x-y)^2 \text{cth}^2 \frac{\alpha}{2})}.$$

Deo II

Rešenja zadataka

UVERTIRA: ISTORIJSKI UVOD

1.1 Poisson-ova zagrada definisana je kao

$$\{A, B\}_{\text{PZ}} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right).$$

a) Polazeći od gornje definicije imamo da je

$$\{A, B\}_{\text{PZ}} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) = - \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} \right) = -\{B, A\}_{\text{PZ}}.$$

Ova osobina Poisson-ovih zagrada se naziva antisimetričnost.

b) Pošto je izvod zbira jednak zbiru izvoda, imamo

$$\begin{aligned} \{A+B, C\}_{\text{PZ}} &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial(A+B)}{\partial q_i} \frac{\partial C}{\partial p_i} - \frac{\partial C}{\partial q_i} \frac{\partial(A+B)}{\partial p_i} \right) \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial C}{\partial p_i} + \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial C}{\partial p_i} - \frac{\partial C}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} - \frac{\partial C}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} \right) \\ &= \{A, C\}_{\text{PZ}} + \{B, C\}_{\text{PZ}}. \end{aligned}$$

c) Opet polazimo od definicije Poisson-ove zagrada i koristimo činjenicu da je izvod konstante nula:

$$\{\alpha A, B\}_{\text{PZ}} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial(\alpha A)}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial(\alpha A)}{\partial p_i} \right) = \alpha \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) = \alpha \{A, B\}_{\text{PZ}}.$$

d) Ovu osobinu dokazujemo koristeći Leibniz-ovo pravilo za izvod proizvoda

$$\begin{aligned} \{AB, C\}_{\text{PZ}} &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial(AB)}{\partial q_i} \frac{\partial C}{\partial p_i} - \frac{\partial C}{\partial q_i} \frac{\partial(AB)}{\partial p_i} \right) \\ &= \sum_{i=1}^n \left(B \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial C}{\partial p_i} + A \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial C}{\partial p_i} - B \frac{\partial C}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} - A \frac{\partial C}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= B \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial C}{\partial p_i} - \frac{\partial C}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) + A \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial C}{\partial p_i} - \frac{\partial C}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} \right) \\
&= B\{A, C\}_{\text{PZ}} + A\{B, C\}_{\text{PZ}}.
\end{aligned}$$

e) Razmotrimo najpre prvi sabirak na levoj strani jednakosti

$$\begin{aligned}
\{\{A, B\}_{\text{PZ}}, C\}_{\text{PZ}} &= \left\{ \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right), C \right\}_{\text{PZ}} \\
&= \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial}{\partial q_j} \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} \right) \frac{\partial C}{\partial p_j} - \frac{\partial C}{\partial q_j} \frac{\partial}{\partial p_j} \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} \right) - (A \leftrightarrow B) \right) \\
&= \sum_{i,j=1}^n \left(\frac{\partial^2 A}{\partial q_j \partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} \frac{\partial C}{\partial p_j} + \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial^2 B}{\partial q_j \partial p_i} \frac{\partial C}{\partial p_j} - \frac{\partial^2 A}{\partial p_j \partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} \frac{\partial C}{\partial q_j} \right. \\
&\quad - \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial^2 B}{\partial p_i \partial p_j} \frac{\partial C}{\partial q_j} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial^2 B}{\partial q_j \partial q_i} \frac{\partial C}{\partial p_j} - \frac{\partial^2 A}{\partial q_j \partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial C}{\partial p_j} \\
&\quad \left. + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial^2 B}{\partial p_j \partial q_i} \frac{\partial C}{\partial q_j} + \frac{\partial^2 A}{\partial p_i \partial p_j} \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial C}{\partial q_j} \right).
\end{aligned}$$

Ovde je uvedena oznaka $-(A \leftrightarrow B)$ koja znači da se oduzima isti izraz u kome su A i B međusobno zamenjeni, a u sledećem koraku su svi članovi eksplicitno ispisani. Preostala dva sabirka sa leve strane jednakosti koju treba da dokažemo dobijamo smenama ($A \rightarrow B$, $B \rightarrow C$, $C \rightarrow A$ u drugom sabirku i $A \rightarrow C$, $B \rightarrow A$, $C \rightarrow B$ u trećem). Kad iste smene uradimo i sa desne strane poslednje jednakosti i saberemo, dobićemo da pod sumom imamo 24 člana (12 sa znakom $+$ i isto toliko sa znakom $-$) i da se oni međusobno potiru, tako da je konačno:

$$\{\{A, B\}_{\text{PZ}}, C\}_{\text{PZ}} + \{\{B, C\}_{\text{PZ}}, A\}_{\text{PZ}} + \{\{C, A\}_{\text{PZ}}, B\}_{\text{PZ}} = 0.$$

Ova osobina Poisson-ove zagrade naziva se Jacobi-jev identitet.

1.2 Čestica koju razmatramo je slobodna, pa je njen lagranžijan

$$L = \frac{1}{2} m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2).$$

a) Generalisani impulsi su:

$$p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}, \quad p_y = \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{y}, \quad p_z = \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = m\dot{z}$$

i oni se poklapaju sa običnim impulsima.

b) Najpre vidimo da su komponente vektora momenta impulsa:

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x.$$

Tražena Poisson-ova zagrada je:

$$\begin{aligned}
\{L_x, L_y\}_{\text{PZ}} &= \{yp_z - zp_y, zp_x - xp_z\}_{\text{PZ}} \\
&= \{yp_z, zp_x\}_{\text{PZ}} - \{yp_z, xp_z\}_{\text{PZ}} - \{zp_y, zp_x\}_{\text{PZ}} + \{zp_y, xp_z\}_{\text{PZ}}.
\end{aligned}$$

Prva i poslednja Poisson-ova zagrada daju nenulti doprinos, dok su druga i treća jednake nuli, što ćemo pokazati koristeći fundamentalne Poisson-ove zagrade koje u ovom slučaju glase

$$\{x, p_x\}_{PZ} = \{y, p_y\}_{PZ} = \{z, p_z\}_{PZ} = 1,$$

dok su sve ostale Poisson-ove zagrade kanonskih promenljivih nula. Stoga se lako pokazuje da važi

$$\begin{aligned} \{y p_z, z p_x\}_{PZ} &= y \{p_z, z p_x\}_{PZ} + p_z \{y, z p_x\}_{PZ} \\ &= y (z \{p_z, p_x\}_{PZ} + p_x \{p_z, z\}_{PZ}) + p_z (z \{y, p_x\}_{PZ} + p_x \{y, z\}_{PZ}) \\ &= -y p_x. \end{aligned}$$

Sličnim postupkom se dobija $\{y p_z, x p_z\}_{PZ} = 0$, $\{z p_y, z p_x\}_{PZ} = 0$ i $\{z p_y, x p_z\}_{PZ} = x p_y$, pa je

$$\{L_x, L_y\}_{PZ} = x p_y - y p_x = L_z.$$

1.3 Da bismo lakše odredili sve tražene izvode u jednačinama kretanja napisaćemo lagranžijan u malo detaljnijem obliku:

$$L = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - e \Phi(x, y, z, t) + \frac{e}{c} (A_x(x, y, z, t) \dot{x} + A_y(x, y, z, t) \dot{y} + A_z(x, y, z, t) \dot{z}).$$

a) Jedna jednačina kretanja je

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0$$

dok se preostale dve dobijaju analogno diferenciranjem po y i z . Pogledajmo šta daje gornja jednačina.

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} &= m \dot{x} + \frac{e}{c} A_x(x, y, z, t) \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} &= m \ddot{x} + \frac{e}{c} \left(\frac{\partial A_x}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial A_x}{\partial y} \dot{y} + \frac{\partial A_x}{\partial z} \dot{z} + \frac{\partial A_x}{\partial t} \right) \\ \frac{\partial L}{\partial x} &= -e \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{e}{c} \left(\frac{\partial A_x}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial A_y}{\partial x} \dot{y} + \frac{\partial A_z}{\partial x} \dot{z} \right), \end{aligned}$$

što daje

$$m \ddot{x} + e \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{e}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{e}{c} \left(\dot{y} \left(\frac{\partial A_x}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial x} \right) + \dot{z} \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \right) = 0.$$

U ovoj jednačini prepoznavamo jačine električnog i magnetnog polja

$$m \ddot{x} - e E_x - \frac{e}{c} (\dot{y} B_z - \dot{z} B_y) = 0 \Rightarrow m \ddot{x} = e \left(E_x + \frac{1}{c} (\vec{v} \times \vec{B})_x \right),$$

a sama jednačina je x -projekcija standardne jednačine kretanja naelektrisane čestice u elektromagnetnom polju,

$$m \ddot{\vec{r}} = e \vec{E} + \frac{e}{c} \vec{v} \times \vec{B}.$$

b) Pri gradijentnim transformacijama skalarni i vektorski potencijal prelaze u

$$\Phi \rightarrow \Phi + \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A} - c \text{ grad } \chi,$$

gde je $\chi = \chi(x, y, z, t)$ proizvoljna funkcija. Lagranžijan prelazi u

$$\begin{aligned} L &\rightarrow \frac{mv^2}{2} - e\left(\Phi + \frac{\partial\chi}{\partial t}\right) + \frac{e}{c}(\vec{A} - c \text{grad}\chi) \cdot \vec{v} \\ &= L - e\frac{\partial\chi}{\partial t} - e \text{grad}\chi \cdot \vec{v} = L - e\left(\frac{\partial\chi}{\partial t} + \frac{\partial\chi}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial\chi}{\partial y}\dot{y} + \frac{\partial\chi}{\partial z}\dot{z}\right) = L - e\frac{d\chi}{dt}. \end{aligned}$$

Kao što vidimo, pri gradijentnoj transformaciji lagranžijan se promeni za totalni izvod funkcije $e\chi$ po vremenu, a takva promena ne menja jednačine kretanja.

c) Generalisani impuls koji odgovara nezavisnoj generalisanoj koordinati x je

$$p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + \frac{e}{c}A_x.$$

Prema tome, komponente generalisanog impulsa nisu jednake $m\vec{v}$ već su:

$$\vec{p} = m\vec{v} + \frac{e}{c}\vec{A}.$$

1.4 Ako u Maxwell-ovim jednačina sa izvorima električno i magnetno polje napišemo preko elektromagnetnih potencijala dobijamo

$$\text{div}\left(-\text{grad}\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\right) = 4\pi\rho, \quad \text{rot rot}\vec{A} = \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\left(-\text{grad}\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\right) + \frac{4\pi}{c}\vec{j}.$$

Pomoću identiteta $\text{div grad}\Phi = (\nabla \cdot \nabla)\Phi = \Delta\Phi$ i $\text{rot rot}\vec{A} = \text{grad div}\vec{A} - \Delta\vec{A}$ (ovde je Δ Laplace-ov operator ili laplasijan) gornje jednačine postaju

$$-\Delta\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\text{div}\vec{A} = 4\pi\rho, \quad \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{A}}{\partial t^2} - \Delta\vec{A} + \text{grad}\left(\text{div}\vec{A} + \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\right) = \frac{4\pi}{c}\vec{j}.$$

1.5 Iz prve i poslednje Maxwell-ove jednačine se dobija:

$$\rho = \frac{1}{4\pi}\text{div}\vec{E}, \quad \vec{j} = \frac{c}{4\pi}\left(\text{rot}\vec{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}\right).$$

Stoga je

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \text{div}\vec{j} = \frac{1}{4\pi}\frac{\partial}{\partial t}\text{div}\vec{E} + \frac{c}{4\pi}\text{div}\left(\text{rot}\vec{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}\right) = 0.$$

Prvi i poslednji sabirak se potiru jer izvodi po vremenu i po koordinatama komutiraju, a drugi sabirak je 0, zbog identiteta $\text{div rot}\vec{B} = 0$. Dakle, jednačina kontinuiteta naelektrisanja je sadržana u Maxwell-ovim jednačinama.

1.6 Skalarna talasna jednačina u tri dimenzije je

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta\right)f(x, y, z, t) = 0.$$

a) U sfernim koordinatama laplasijan deluje na sledeći način

$$\Delta f(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)f(r, \theta, \varphi).$$

Deo laplasijana koji sadrži izvode po radijalnoj koordinati r naziva se radijalni deo. Sada ćemo da pokažemo da se taj deo laplasijana može napisati na još dva različita načina. Najpre pogledajmo kako radijalni deo laplasijana deluje na funkciju f :

$$f \xrightarrow{r^2 \frac{\partial}{\partial r}} r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \xrightarrow{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}} \frac{1}{r^2} \left(2r \frac{\partial f}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} \right) = \frac{2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial^2 f}{\partial r^2}.$$

Sad ćemo pokazati da i druga dva operatora delovanjem na funkciju daju isti rezultat:

$$f \xrightarrow{\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rf) = \frac{1}{r} \left(f + r \frac{\partial f}{\partial r} \right) \xrightarrow{\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(f + r \frac{\partial f}{\partial r} \right) = \frac{2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial^2 f}{\partial r^2}.$$

$$f \xrightarrow{\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rf) = \frac{2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial^2 f}{\partial r^2},$$

čime smo dokazali da važi:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r.$$

b) Razmotrimo funkciju

$$F(r, t) = \frac{A}{r} e^{i\omega t \pm ikr}.$$

Treba da pokažemo da je ova funkcija rešenje trodimenzionone talasne jednačine, odnosno da važi:

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) F(r, t) = 0.$$

Pošto funkcija $F(r, t)$ zavisi od radijalne koordinate, laplasijan ćemo napisati u sfernim koordinatama. Ugaoni deo laplasijana kad deluje na $F(r, t)$ daje 0 jer nemamo eksplicitne θ i φ zavisnosti. Ako radijalni deo laplasijana napišemo u trećem obliku iz prethodnog dela zadatka, onda se talasna jednačina svodi na:

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \right) F(r, t) = 0.$$

Data funkcija je zaista rešenje ove jednačine jer je:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \frac{A}{r} e^{i\omega t \pm ikr} = -\frac{\omega^2}{c^2} \frac{A}{r} e^{i\omega t \pm ikr}, \quad \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \frac{A}{r} e^{i\omega t \pm ikr} = -k^2 \frac{A}{r} e^{i\omega t \pm ikr}$$

pa se gornja jednačina svodi na

$$\left(-\frac{\omega^2}{c^2} + k^2 \right) \frac{A}{r} e^{i\omega t \pm ikr} = 0,$$

što jeste zadovoljeno ako je $\omega = kc$.

1.7 Kad se mikroskop nalazi na rastojanju x od jednog zvučnika, onda je od drugog zvučnika udaljen $\sqrt{x^2 + d^2}$. Fazna razlika talasa koji dolaze od zvučnika je

$$\Delta\varphi = k \left(\sqrt{x^2 + d^2} - x \right) = \frac{2\pi}{\lambda} \left(\sqrt{x^2 + d^2} - x \right).$$

Uslov za konstruktivnu interferenciju je $\Delta\varphi_{\text{konst}} = 2\pi n$ gde je $n \in \mathbb{N}$ a to je ostvareno na rastojanjima

$$x_{\text{konst}} = \frac{d^2 - n^2 \lambda^2}{2n\lambda}.$$

Destruktivna interferencija nastupa kad je $\Delta\varphi_{\text{destr}} = (2n + 1)\pi$, a tad su rastojanja od zvučnika do mikrofona

$$x_{\text{destr}} = \frac{4d^2 - (2n + 1)^2\lambda^2}{4(2n + 1)\lambda}.$$

1.8 Ako veličina $A(x)$ ima statistički karakter onda postoji raspodela verovatnoće $\rho(x)$ pomoću koje određujemo njene očekivane vrednosti. Očekivana vrednost proizvoljne funkcije $g(A)$ dobija se kao

$$\langle g(A) \rangle = \int_a^b dx \rho(x) g(A(x)),$$

gde se integrali po svim mogućim vrednostima nezavisne promenljive x .

a) Kvadrat disperzije neke veličine jednak je srednjem kvadratnom odstupanju od srednje vrednosti, $(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle$. Dalje imamo

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \int_a^b dx \rho(x) (A(x) - \langle A \rangle)^2 = \int_a^b dx \rho(x) (A^2 - 2\langle A \rangle A + \langle A \rangle) \\ &= \int_a^b dx \rho(x) A(x)^2 - 2\langle A \rangle \underbrace{\int_a^b dx \rho(x) A(x)}_{\langle A \rangle} + \langle A \rangle^2 \underbrace{\int_a^b dx \rho(x)}_1 \\ &= \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2. \end{aligned}$$

Ovde je iskorišćena činjenica da je $\langle A \rangle$ broj pa se pri integraciji ponaša kao konstanta.

b) Ovo se lako pokazuje:

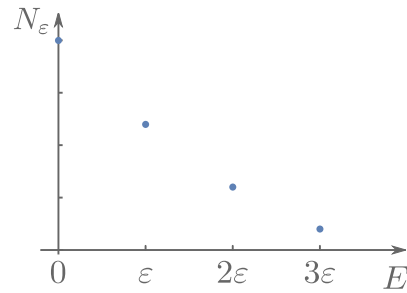
$$(\Delta A)^2 = \int_a^b dx \underbrace{\rho(x)}_{\geq 0} \underbrace{(A(x) - \langle A \rangle)^2}_{\geq 0} \Rightarrow (\Delta A)^2 \geq 0.$$

1.9 Sistem se sastoji od četiri čestice i na raspolaganju ima energiju $E = 3\varepsilon$. Pošto je sistem izolovan nema razmene energije s okolinom, tako da se energija razmenjuje samo između čestica koje čine sistem. Da bismo našli verovatnoće da pojedine čestice imaju određenu energiju potrebno je da vidimo koja su sve stanja moguća i koliki je među njima broj stanja s određenom energijom. Energija može da se raspodeli na sledeće načine:

- $E = 3\varepsilon + 0 + 0 + 0$. Ova konfiguracija se može ostvariti na četiri različita načina (sva energija na prvoj, drugoj, trećoj ili četvrtoj čestici).
- $E = 2\varepsilon + \varepsilon + 0 + 0$. Postoji $4 \cdot 3 = 12$ stanja sa ovakvom raspodelom energije (energiju 2ε ima jedna od četiri čestice, a ε jedna od preostale tri čestice).
- $E = \varepsilon + \varepsilon + \varepsilon + 0$. Ova raspodela energije može da se ostvari na četiri načina (energiju 0 ima prva, druga, treća ili četvrta čestica).

Sad možemo da izbrojimo kako je energija raspoređena među česticama. Energiju $E = 0$ imaju tri čestice u prvoj konfiguraciji, koja se realizuje na 4 načina, dve čestice u drugoj konfiguraciji, koja može da nastupi na 12 različitih načina i jedna čestica u trećoj konfiguraciji, a ona nastaje na 4 načina. Dakle, broj čestica sa energijom $E = 0$ je

$$N_{E=0} = 3 \cdot 4 + 2 \cdot 12 + 1 \cdot 4 = 40.$$



Slika 1.1: Raspodela energija u sistemu.

Na isti način prebrojavamo koliko ima čestica s ostalim vrednostima energije:

$$N_{E=\varepsilon} = 1 \cdot 12 + 3 \cdot 4 = 24, \quad N_{E=2\varepsilon} = 1 \cdot 12 = 12, \quad N_{E=3\varepsilon} = 1 \cdot 4 = 4.$$

Ukupan broj konfiguracija čestica je $N = N_{E=0} + N_{E=\varepsilon} + N_{E=2\varepsilon} + N_{E=3\varepsilon} = 80$, pa su verovatnoće za moguće energije

$$P_{E=0} = \frac{N_{E=0}}{N} = 0.5, \quad P_{E=\varepsilon} = \frac{N_{E=\varepsilon}}{N} = 0.3, \quad P_{E=2\varepsilon} = \frac{N_{E=2\varepsilon}}{N} = 0.15, \quad P_{E=3\varepsilon} = \frac{N_{E=3\varepsilon}}{N} = 0.05.$$

Nacrtamo li dobijenu raspodelu (slika 1.1) vidimo da ona izgleda kao eksponencijalna opadajuća funkcija, što odgovara Boltzmann-ovoj raspodeli.

1.10 Particiona funkcija je

$$Z = \sum_{k=1}^3 e^{-\frac{E_k}{k_B T}} = 8.05,$$

a verovatnoće pojedinačnih energija su:

$$\rho_1 = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_1}{k_B T}} = 0.86, \quad \rho_2 = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_2}{k_B T}} = 0.12, \quad \rho_3 = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_3}{k_B T}} = 0.02.$$

Srednja energija je

$$\langle E \rangle = \sum_{k=1}^3 E_k \rho_k = 6.72 \cdot 10^{-22} \text{ J}.$$

Disperziju ćemo odrediti kao $\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}$. Pošto je

$$\langle E^2 \rangle = \sum_{k=1}^3 E_k^2 \rho_k = 5.61 \cdot 10^{-41} \text{ J}^2,$$

imamo

$$\Delta E = 3.3 \cdot 10^{-21} \text{ J}.$$

1.11 Wien-ov zakon određuje frekvencu (talasnu dužinu) na kojoj Planck-ova raspodela

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

ima maksimum. Stoga ćemo uvesti bezdimenzionu veličinu $\xi = \beta \hbar \omega$ preko koje je Planck-ova raspodela izražena kao funkcija

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

Funkcija $u(\xi)$ ima maksimum u

$$\frac{du}{d\xi} = 0 \Rightarrow \frac{\xi^2(e^\xi(3-\xi)-3)}{(e^\xi-1)^2} = 0 \Rightarrow e^\xi(3-\xi)-3 = 0 \Rightarrow 1 - \frac{\xi}{3} = e^{-\xi}$$

Ova transcendentna jednačina može da se reši numerički. *Mathematica*TM omogućava da se nađe rešenje pomoću komande

FindRoot[Exp[-x] - 1 + x/3 == 0, {x, 3}]

To rešenje je {x -> 2.82144} i ono daje frekvencu na kojoj Planck-ova raspodela ima maksimum:

$$\omega = \frac{2.82144 \cdot k}{\hbar} T = 3.7 \cdot 10^{11} \cdot T$$

i to je Wien-ov zakon pomeranja. Često se Wien-ov zakon formuliše preko vrednosti talasne dužine na kojoj je Planck-ova raspodela maksimalna i ona od temperature zavisi kao $\lambda = b/T$, gde je $b = 2.9 \cdot 10^{-3} \text{K/m}$ Wien-ova konstanta.

1.12 Energija koja u jedinici vremena pada na jedinicu površine planete jednaka je

$$\dot{E}_{\text{in}} = L \frac{r^2 \pi}{4\pi d^2},$$

gde je r poluprečnik planete. Samo 80% te energije se apsorbuje i temperatura planete raste sve dok ona ne izrači istu količinu energije u jedinici vremena kao što je i apsorbuje. Tada važi:

$$0.8L \frac{r^2}{4d^2} = \sigma T^4 (4r^2 \pi) \Rightarrow T = \sqrt[4]{\frac{0.8L}{16\pi\sigma d^2}} = 261.5 \text{K} = -11.5^\circ \text{C}.$$

Planeta ima spektar crnog tela, pa talasnu dužinu na kojoj ona emituje najviše zračenja možemo da nađemo iz Wien-ovog zakona.

1.13 Energija koju izrači crno telo u opsegu talasnih dužina $(\omega, \omega + d\omega)$ data je Planck-ovom raspodelom

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

Pošto je $\omega = 2\pi c/\lambda$ onda je $d\omega = -2\pi c d\lambda/\lambda^2$ (ovaj znak – ukazuje da povećanje frekvence dovodi do smanjenja talasne dužine, pa za infinitezimalnu širinu intervala nije važan) tako da imamo:

$$u(\omega)d\omega = u(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{\beta hc}{\lambda}\right) - 1} d\lambda.$$

Ovde je $h = 2\pi\hbar$ Planck-ova konstanta.

1.14 Planck-ov zakon upoznali smo u formi spektralne gustine energije u zavisnosti od frekvencije $u(\omega)$ i talasne dužine $u(\lambda)$. Ako spektralne gustine energije pomnožimo sa $c/(4\pi)$ dobićemo spektralnu gustinu energije koja je izračena u jedinici vremena sa jedinice površine crnog tela dI . U ovom zadatku dati su podaci koji se odnose na spektralnu raspodelu po talasnim dužinama mikrotalasnog pozadinskog zračenja

$$dI = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/(\lambda kT)} - 1} d\lambda \Rightarrow e^{hc/(\lambda kT)} = 1 + \frac{2\pi hc^2 d\lambda}{\lambda^5 dI} \Rightarrow T = \frac{hc}{\lambda k \ln\left(1 + \frac{2\pi hc^2 d\lambda}{\lambda^5 dI}\right)} = 2.724 \text{K}.$$

1.15 Električno polje možemo napisati u obliku

$$\begin{aligned}\vec{E} &= \vec{E}_0 \operatorname{Re} \left((1 + \cos \omega t) \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_0 t) \right) \\ &= \vec{E}_0 \operatorname{Re} \left((1 + \cos \omega t) \left(\cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_0 t) + i \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_0 t) \right) \right) \\ &= \vec{E}_0 \left(\cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_0 t) + \frac{1}{2} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - (\omega_0 + \omega) t) + \frac{1}{2} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - (\omega_0 - \omega) t) \right).\end{aligned}$$

Prema tome, na litijumsku pločicu padaju fotoni ugaonih frekvenci $\omega_1 = \omega$, $\omega_2 = \omega_0 - \omega$ i $\omega_3 = \omega_0 + \omega$. Najveću energiju imaju fotoni s najvećom ugaonom frekvencijom i oni će dati fotone sa najvećom kinetičkom energijom, koju određujemo na osnovu Einstein-ove jednačine za fotoelektrični efekat:

$$\hbar \omega_3 = A + T_{\max} \Rightarrow T_{\max} = \hbar \omega_3 - A = 0.37 \text{ eV}.$$

1.16 Compton-ovo rasejanje opisano je u osnovnom tekstu u poglavlju 1.6.

- a) Ako jednačinu (1.68) napišemo preko energije fotona pre E i posle E' rasejanja, lako nalazimo koliko je E' :

$$\frac{\hbar}{E'} = \frac{\hbar}{E} + \frac{\hbar}{mc^2} (1 - \cos \theta) \Rightarrow E' = \frac{E}{1 + \frac{E}{mc^2} (1 - \cos \theta)}.$$

- b) Zakon održanja energije za Compton-ovo rasejanje glasi

$$E + mc^2 = E' + mc^2 + T,$$

gde je T kinetička energija elektrona iz čega dalje sledi

$$T = E - E' = E - \frac{E}{1 + \frac{E}{mc^2} (1 - \cos \theta)} = \frac{\frac{E^2}{mc^2} (1 - \cos \theta)}{1 + \frac{E}{mc^2} (1 - \cos \theta)}.$$

- c) Iz zakona održanja impulsa imamo:

$$p = p' \cos \theta + p_e \cos \varphi, \quad 0 = -p' \sin \theta + p_e \sin \varphi.$$

Ovde su $p = E/c$ i $p' = E'/c$ impuls fotona pre i posle rasejanja dok je p_e impuls elektrona. Iz ove dve jednačine dalje imamo

$$p_e \cos \varphi = \frac{E}{c} - \frac{E'}{c} \cos \theta, \quad p_e \sin \varphi = \frac{E'}{c} \sin \theta.$$

Kad podelimo drugu jednačinu s prvom, dobijamo

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{E' \sin \theta}{E - E' \cos \theta} = \frac{\frac{E \sin \theta}{1 + \frac{E}{mc^2} (1 - \cos \theta)}}{E - \frac{E \cos \theta}{1 + \frac{E}{mc^2} (1 - \cos \theta)}} = \frac{E \sin \theta}{E \left(1 + \frac{E}{mc^2}\right) (1 - \cos \theta)},$$

iz čega sledi tražena relacija

$$\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} = \left(1 + \frac{E}{mc^2}\right) \operatorname{tg} \varphi.$$

1.17 Pri Compton-ovom rasejanju za ugao θ talasna dužina se smanji za iznos

$$\Delta\lambda = \lambda_C(1 - \cos\theta).$$

Foton koji se dva puta raseje pod uglom 90° promeni svoju talasnu dužinu za

$$\Delta\lambda_1 = 2\lambda_C \left(1 - \cos\frac{\pi}{2}\right) = 2\lambda_C,$$

dok foton koji se tri puta rasejava pod uglom 60° menja talasnu dužinu za

$$\Delta\lambda_2 = 3\lambda_C \left(1 - \cos\frac{\pi}{3}\right) = \frac{3}{2}\lambda_C.$$

1.18 Inicijalni snop sastoji se od α -čestice koje s velike udaljenosti kreću ka meti (jezgru) brzinom v s različitim parametrima sudara b (udaljenosti između pravca početne brzine i centra jezgra). Interakcija α -čestice i jezgra je Coulomb-ova obojna sila, koja je centralna (tako da je očuvan moment impulsa) i konzervativna (zbog toga na velikim rastojanjima u inicijalnom i finalnom stanju α -čestica ima isti intenzitet brzine). Trajektorija α -čestice je hiperbola, a njene karakteristike zavise samo od parametra sudara. Postavimo centar koordinatnog sistema u jezgro i neka se x -osa poklapa s pravcem koji spaja jezgro sa tačkom u kojoj je α -čestica najbliže jezgru. Položaj α -čestice opišaćemo polarnim koordinatama (r, φ) . Iz zakona održanja momenta impulsa imamo

$$L = m_\alpha r^2 \dot{\varphi} = \text{const} = m_\alpha v b \Rightarrow \dot{\varphi} = \frac{v b}{r^2}.$$

Iz II Newton-ovog zakona imamo:

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} \Rightarrow d\vec{p} = \vec{F} dt \Rightarrow dp = F \cos\varphi dt \Rightarrow \Delta p = \int F \cos\varphi dt = Q_1 Q_2 \int \frac{1}{r^2} \cos\varphi dt.$$

Ovde smo iskoristili simetriju problema, da je trajektorija simetrična u odnosu na osu $\varphi = 0$. Iz zakona održanja momenta impulsa sledi da je $dt/r^2 = d\varphi/(vb)$, pa se gornji integral može svesti na integral po uglovima, gde je lako odrediti granice integracije. Označimo sa θ ugao skretanja α -čestice, imamo da je

$$\Delta p = Q_1 Q_2 \int_{-\frac{\pi+\theta}{2}}^{\frac{\pi+\theta}{2}} \cos\varphi \frac{d\varphi}{vb} = \frac{Q_1 Q_2}{vb} 2 \cos\frac{\theta}{2}.$$

S druge strane, pošto je trougao sastavljen od vektora inicijalnog impulsa \vec{p}_i , finalnog impulsa \vec{p}_f i razlike impulsa $\Delta\vec{p} = \vec{p}_f - \vec{p}_i$ jednakokrak, sa uglom među kracima θ , imamo da je:

$$\sin\frac{\theta}{2} = \frac{\Delta p/2}{p} \Rightarrow \Delta p = 2p \sin\frac{\theta}{2}.$$

Prema tome, vidimo da je ugao skretanja povezan s parametrom sudara na sledeći način:

$$b = \frac{Q_1 Q_2}{vp} \frac{1}{\text{tg}\frac{\theta}{2}} = \frac{Q_1 Q_2}{m_\alpha v^2} \frac{1}{\text{tg}\frac{\theta}{2}}.$$

Pošto čestice iz prstena definisanog parametrima sudara b i $b + db$ rasejavaju između uglova θ i $\theta + d\theta$ diferencijalni presek $d\sigma$ za rasejanje u ugao θ definiše se kao

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \frac{2\pi b db}{2\pi \sin\theta d\theta} = \frac{b}{\sin\theta} \frac{db}{d\theta} = \frac{Q_1 Q_2}{m_\alpha v^2} \frac{1}{\text{tg}\frac{\theta}{2}} \frac{1}{2 \sin\frac{\theta}{2} \cos\frac{\theta}{2}} \frac{Q_1 Q_2}{m_\alpha v^2} \frac{1}{2 \sin^2\frac{\theta}{2}} = \frac{Q_1^2 Q_2^2}{4 m_\alpha^2 v^4} \frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}.$$

Ovu formulu dokazaćemo još jednom, pri kraju ove knjige, koristeći formalizam kvantne mehanike.

1.19 Po pretpostavci zadatka, gubitak energije pri jednom obilasku elektrona oko jezgra je mnogo manji od kinetičke energije elektrona, pa je i promena prečnika kruga po kome se kreće elektron mnogo manji od samog poluprečnika elektrona. Uzećemo zato da se u toku jednog obilaska elektron kreće po krugu poluprečnika r i onda važi:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \Rightarrow v = \sqrt{\frac{e^2}{mr}}.$$

Ovde su v brzina, m masa elektrona, e je elementarno naelektrisanje.

a) Kinetička energija elektrona je

$$T = \frac{mv^2}{2} = \frac{e^2}{2r}.$$

Primenu energije u toku jednog perioda procenićemo na osnovu Larmor-ove formule

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{e^2 a^2}{c^3} \Rightarrow |\Delta E| = \left| \frac{dE}{dt} \right| \tau = \frac{2}{3} \frac{e^2 a^2}{c^3} \tau = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \left(\frac{v^2}{r} \right)^2 \frac{2\pi r}{v} = \frac{4\pi}{3} \frac{e^2}{r} \left(\frac{v}{c} \right)^3.$$

Ovde je uveden period orbite elektrona $\tau = 2\pi r/v$. Kao što vidimo, odnos gubitka energije i kinetičke energije elektrona je

$$\frac{|\Delta E|}{T} = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{v}{c} \right)^3,$$

a to je zaista mala veličina, jer je po Bohr-ovom modelu $v/c \sim \alpha = 1/137$, tako da je

$$\frac{|\Delta E|}{T} = 3.26 \cdot 10^{-6}.$$

b) Ukupna energija elektrona je

$$E = T + U = \frac{e^2}{2r} - \frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{2r},$$

pa je na osnovu Larmor-ove formule

$$\frac{d}{dt} \left(-\frac{e^2}{2r} \right) = -\frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \left(\frac{v^2}{r} \right)^2 \Rightarrow \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{r} \right) = \frac{4}{3} \frac{v^4}{c^3 r^2} = \frac{4}{3} \frac{v^4}{c^3 r^2} = \frac{4e^4}{3m^2 c^3 r^4}.$$

Dobijamo diferencijalnu jednačinu

$$-\frac{1}{r^2} \frac{dr}{dt} = \frac{4e^4}{3m^2 c^3 r^4} \Rightarrow r^2 dr = -\frac{4e^4}{3m^2 c^3} dt \Rightarrow \int_{r_i}^{r_f} r^2 dr = -\frac{4e^4}{3m^2 c^3} \int_0^{\tau_f} dt,$$

pa je konačno

$$\tau_f = \frac{m^2 c^3}{4e^4} (r_i^3 - r_f^3) = 10^{-10} \text{ s}.$$

Ovo je vrlo kratko vreme, tako da je atoma vodonika na osnovu planetarnog modela prilično nestabilna čestica.

1.20 Pretpostavimo da se čestica kreće po kružnoj orbiti tako da se centripetalna sila izjednačava sa silom elastičnosti, pa je

$$m \frac{v^2}{r} = m\omega^2 r \Rightarrow v = \omega r.$$

Ako uzmemo u obzir pretpostavke Bohr-ovog modela o kvantovanju momenta impulsa, na dozvoljenim orbitama čestice ima moment impulsa $n\hbar$, pa je

$$L_n = n\hbar \Rightarrow mr_n v_n = n\hbar \Rightarrow m\omega r_n^2 = \hbar n \Rightarrow r_n = \sqrt{\frac{n\hbar}{m\omega}}, \quad v_n = r_n \omega = \sqrt{\frac{n\hbar\omega}{m}}.$$

Energija čestice je zbir kinetičke i potencijalne energije, dakle

$$E = T + U \Rightarrow E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 r_n^2 = \frac{m}{2} \frac{n\hbar\omega}{m} + \frac{m\omega^2}{2} \frac{n\hbar}{m\omega} = n\hbar\omega.$$

Isti rezultat se dobija i Sommerfeld-ovim pravilom kvantovanja, mada ćemo videti da se energija harmonijskog oscilatora kvantuje na malo drugačiji način.

1.21 Sistem ima jedan stepen slobode, generalisani impuls konjugovan koordinati x je $p = m\dot{x}$. Za ovaj sistem, Sommerfeld-ovo pravilo kvantovanja možemo da napišemo

$$2 \int_{x_1}^{x_r} p dx = 2\pi n\hbar.$$

Ovde su x_1 i x_r povratne tačke u kojima se klasična čestica zaustavi. Faktor 2 dolazi otud što se u toku jednog perioda sistem kreće od x_1 do x_r i nazad, pri čemu je u oba dela kretanja integral jednak, pa se može videti kao dvostruka vrednost integrala na polovini puta. Koristeći zakon održanja energije impuls može da se napiše kao:

$$\frac{p^2}{2m} + D(e^{-2ax} - 2e^{-ax}) = E \Rightarrow p = \sqrt{2m(E - D(e^{-2ax} - 2e^{-ax}))},$$

pa je uslov kvantovanja

$$\int_{x_1}^{x_r} \sqrt{2m(E - D(e^{-2ax} - 2e^{-ax}))} dx = \pi n\hbar.$$

Povratne tačke su koreni jednačine:

$$E - D(e^{-2ax} - 2e^{-ax}) = 0.$$

Da bismo ih našli zgodno je uvesti smenu $y = \exp(-ax)$, preko koje se gornja jednačina svodi na kvadratnu jednačinu

$$\epsilon - y^2 + 2y = 0.$$

Ovde je uveden bezdimenzioni parametar $\epsilon = E/D$. Dobijena kvadratna jednačina ima dva rešenja $y_{1,2} = 1 \pm \sqrt{1 + \epsilon}$. I u uslovu kvantovanja, u integralu uvodimo ista smena kao i u kvadratnoj jednačini $x = -\ln(x)/a$, i dobijamo:

$$-\frac{\sqrt{2mD}}{a} \int_{y_2}^{y_1} \sqrt{\epsilon - y^2 + 2y} \frac{dy}{y} = \pi n\hbar$$

jer je $dx = -dx/(ax)$. Ovaj integral ne spada u elementarne, ali može da se nađe rešenje (u tablicama integrala, a i *Mathematica*TM može da pomogne) i ono ima vrlo jednostavan oblik:

$$\frac{\sqrt{2mD}}{a} (1 + \sqrt{-\epsilon}) \pi = \pi n\hbar.$$

U ovoj jednačini vratimo oznake koje smo uveli ranije i izvršimo elementarne matematičke operacije da bismo dobili spektar

$$E_n = -D + a\hbar\sqrt{\frac{2D}{m}}n - \frac{a^2\hbar^2}{2m}n^2.$$

Broj n je diskretan, kreće od 1, ali ima maksimalnu vrednost. Nju određujemo iz uslova da E_n rastući niz. Naime, ako n poraste za 1, a to dovede do smanjenja energije, to ukazuje da formula za energiju nije dobra. Vrednost n za koju je E_n ekstremalno možemo formalno dobiti ako potražimo $dE_n/dn = 0$ što daje

$$a\hbar\sqrt{\frac{2D}{m}} - 2\frac{a^2\hbar^2}{2m}n = 0 \Rightarrow n < \frac{\sqrt{2mD}}{a\hbar}$$

Dakle, kvantni broj n uzima vrednosti $n = 1, 2, \dots, n_{\max} < \sqrt{2mD}/(a\hbar)$. Dobijeni rezultati ukazuju da Morse-ov potencijal ima spektar koji je dominantno harminijski (drugi sabirak u izrazu za E_n) sa anharmonijskom komponentom (poslednji član u E_n).

1.22 Energija jonizacije litijuma je

$$E = \frac{Z_{\text{eff}}^2 E_1}{n^2},$$

gde su Z_{eff} efektivno naelektrisanje, $E_1 = -13.6\text{eV}$ i $n = 2$ (jer se elektron nalazi na drugom elektronskom nivou). Prema tome, traženo efektivno naelektrisanje je

$$Z_{\text{eff}} = 2\sqrt{\frac{E}{E_1}} = 1.26.$$

1.23 Energija jednog fotona je $E_1 = h\nu$. Svake sekunde $t = 1\text{s}$ mikrotalasna pać generiše energiju $E = Pt = NE_1$ tako da je broj fotona koji nastaje:

$$N = \frac{Pt}{h\nu} = 6.06 \cdot 10^{26}.$$

1.24 Difrakcija elektrona ukazuje na njihovu talasnu prirodu. Eksperiment pokazuje da difrakcija elektrona ima puno sličnosti sa difrakcijom X-zraka, koja je opisana Bragg-ovim zakonom $n\lambda = d \sin\theta$. Ovde je d rastojanje između dve ravni kristalne rešetke, dok je θ ugao između upadnog snopa i ravni kristalne rešetke. Ako sa ϕ označimo ugao između upadnog i snopa rasejanih elektrona imamo da je $\theta + \phi + \theta = \pi$. Uvedimo i pomoćni ugao $\alpha = 2\phi$ koji zadovoljava $\alpha = \pi/2 - \theta$ imamo da je $\sin\theta = \cos\alpha$ pa se Bragg-ov zakon može napisati:

$$n\lambda = 2d \sin\theta \Rightarrow n\lambda = 2d \cos\alpha.$$

Dalje je potrebno naći vezu rastojanja između ravni rešetke d i međuatomskog rastojanja D (videti sliku 1.2). Vidimo da je $\sin\alpha = d/D$ pa imamo

$$n\lambda = 2D \sin\alpha \cos\alpha = D \sin(2\alpha) = D \sin\phi.$$

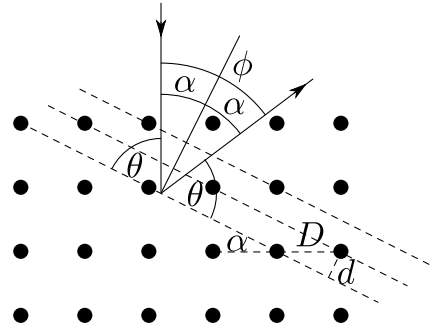
Pošto je prvi difrakcioni maksimum $n = 1$ na uglu $\phi = 50^\circ$ za međuatomsko rastojanje $D = 0.215\text{nm}$ talasna dužina elektrona je

$$\lambda = \frac{D \sin\phi}{n} = 1.65 \cdot 10^{-10} \text{ m}.$$

Talasnu dužinu možemo da nađemo i na osnovu de Broglie-eve pretpostavke.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mT}} = 1.66 \cdot 10^{-10} \text{ m},$$

što je jako dobro slaganje sa eksperimentalnim rezultatom.



Slika 1.2: Rasejanje elektrona na kristalnoj rešeci nikla.

1.25 Kao i u nerelativističkom slučaju, česticu opisujemo ravnim talasom

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

gde su talasni vektor $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$ i frekvencija $\omega = E/\hbar$. Da bismo dobili relativističku disperzioni relaciju $E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$, formiramo sledeću jednačinu

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(\vec{r}, t) = (-c^2 \hbar^2 \nabla^2 + m^2 c^4) \Psi(\vec{r}, t).$$

Podelimo li gornju jednačinu sa $\hbar^2 c^2$ dobijamo Klein-Gordon-ovu jednačinu

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Psi(\vec{r}, t) = 0.$$

Ova jednačina opisuje česticu spina 0.

JEDNODIMENZIONNI SISTEMI

2.1 Gustine verovatnoće za prva četiri stanja harmonijskog oscilatora data su na slici 2.1. To su funkcije:

$$\begin{aligned} |\psi_0(\xi)|^2 &= \pi^{-1/2} e^{-\xi^2}, \\ |\psi_1(\xi)|^2 &= (4\pi)^{-1/2} 4\xi^2 e^{-\xi^2}, \\ |\psi_2(\xi)|^2 &= (4\pi)^{-1/2} (2\xi^2 - 1)^2 e^{-\xi^2}, \\ |\psi_3(\xi)|^2 &= (144\pi)^{-1/2} (2\xi^3 - 3\xi)^2 e^{-\xi^2}. \end{aligned}$$

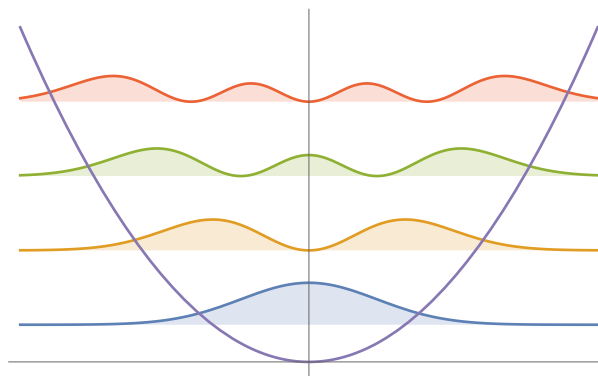
U osnovnom stanju gustina verovatnoće je normalna Gauss-ova raspodela. Sledeće stanje za $n = 1$ ima jednu nulu gustine verovatnoće i ona se nalazi u $x = 0$, odnosno u ravnotežnom položaju harmonijskog oscilatora. Svako sledeće stanje, ima jednu nulu više i vidimo sa se u ravnotežnom položaju naizmenično pojavljuju lokalni maksimum i nula.

2.2 Hermite-ovi polinomi $H_n(\xi)$ zadovoljavaju relacije ortogonalnosti

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

što će biti dokazano u zadatku **2.5**. Dobili smo da je talasna funkcija harmonijskog oscilatora

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



Slika 2.1: Gustine verovatnoće za prva četiri stanja, slika uz rešenje zadatka 2.1.

Uslov ortogonalnosti talasnih funkcija je

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(\xi) \psi_m(\xi) d\xi = \delta_{nm}$$

Kada je $n = m$ imamo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^2(\xi) d\xi = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} A_n^2 H_n(\xi) H_n(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 1 \Rightarrow A_n^2 \sqrt{\pi} 2^n n! = 1,$$

pa su normalizacione konstante

$$A_n = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{2^n n!}}.$$

Dakle, normirane talasne funkcije su

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}.$$

Često talasnu funkciju prišemo preko koordinate x , koja je s bezdimenzionom koordinatom ξ povezana na sledeći način

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

Talasna funkcija koja zavisi od x je

$$\psi_n(x) = B_n H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2},$$

gde je B_n konstanta normiranja koju ćemo sad odrediti. Pošto je

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^2(x) dx &= 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} B_n^2 H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = 1 \\ &\Rightarrow B_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) H_n(\xi) e^{-\xi^2} d\xi \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = 1 \\ &\Rightarrow B_n^2 \sqrt{\pi} 2^n n! \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = 1 \\ &\Rightarrow B_n = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi \hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}. \end{aligned}$$

Prema tome, normirana talasna funkcija harmnijskog oscilatora koja zavisi od koordinate x je

$$\psi_n(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi \hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}.$$

2.3 Nulti Hermite-ov polinom je $H_0(x) = 1$. To lako dobijamo

$$H_0(x) = (-1)^0 e^{x^2} e^{-x^2} = 1,$$

$$H_0(x) = e^{\frac{x^2}{2}} e^{-\frac{x^2}{2}} = 1,$$

$$H_0(x) = \left(2x - \frac{d}{dx}\right)^0 1 = 1.$$

Sledeći Hermite-ov polinom je $H_1(x) = 2x$, što se zaista dobija:

$$H_1(x) = (-1)^1 e^{x^2} \frac{d}{dx} e^{-x^2} = -e^{x^2} (-2x) e^{-x^2} = 2x,$$

na osnovu druge formule:

$$H_1(x) = e^{\frac{x^2}{2}} \left(x - \frac{d}{dx}\right) e^{-\frac{x^2}{2}} = e^{\frac{x^2}{2}} (x + x) e^{-\frac{x^2}{2}} = 2x,$$

ili pomoću formule:

$$H_1(x) = \left(2x - \frac{d}{dx}\right) 1 = 2x.$$

Sledeći Hermite-ov polinom je $H_2(x) = 4x^2 - 2$ jer je

$$H_2(x) = (-1)^2 e^{x^2} \frac{d^2}{dx^2} e^{-x^2} = e^{x^2} (4x^2 - 2) e^{-x^2} = 4x^2 - 2,$$

odnosno

$$H_2(x) = e^{\frac{x^2}{2}} \left(x - \frac{d}{dx}\right)^2 e^{-\frac{x^2}{2}} = e^{\frac{x^2}{2}} \left(x - \frac{d}{dx}\right) 2x e^{-\frac{x^2}{2}} = e^{\frac{x^2}{2}} (2x^2 - 2 + 2x^2) e^{-\frac{x^2}{2}} = 4x^2 - 2,$$

ili

$$H_2(x) = \left(2x - \frac{d}{dx}\right)^2 1 = \left(2x - \frac{d}{dx}\right) 2x = 4x^2 - 2.$$

Pomoću funkcije generatriše takođe nalazimo Hermite-ove polinome. Tu koristimo razvoj eksponencijalne funkcije u red. Pošto su nam potrebna prva tri Hermite-ova polinoma, onda nas interesuje razvoj funkcije generatriše zaključno sa članom t^2 .

$$e^{2xt-t^2} = 1 + (2xt - t^2) + \frac{1}{2} (2xt - t^2)^2 + \dots = 1 + 2xt + \frac{1}{2} (4x^2 - 2) t^2 + \dots$$

iz čega se prepoznaju isti Hermite-ovi polinomi kao i u ranijim primerima.

2.4 Rekurentne relacije među Hermite-ovim polinomima dokazuju se ili preko funkcije generatriše ili neke od reprezentacija Hermite-ovih polinomea. Prvi identitet ćemo dokazati koristeći funkciju generatriše. Polazimo od definicije

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

Pošto u identitetu figuriše izvod Hermite-ovog polinoma, njega lako možemo da dobijemo sa desne strane gornje jednakosti ako diferenciramo po x . Pošto je generatriša funkcija dve promenljive, onda moramo da koristimo parcijalni izvod po x i dobijamo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} e^{2xt-t^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!} \Rightarrow 2t e^{2xt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{dH_n(x)}{dx} \frac{t^n}{n!} \\ &\Rightarrow 2t \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{dH_n(x)}{dx} \frac{t^n}{n!} \\ &\Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} 2H_n(x) \frac{t^{n+1}}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{dH_n(x)}{dx} \frac{t^n}{n!} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} 2H_{n-1}(x) \frac{t^n}{(n-1)!} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{dH_n(x)}{dx} \frac{t^n}{n!}.$$

Ovde je iskorišćeno da je u sumi $dH_n(x)/dx t^n/n!$ prvi sabirak (za $n=0$) jednak 0, jer je prvi Hermite-ov polinom 1, pa je njegov izvod 0. Zato smo uzeli da suma ide od $n=1$. Ostali postupci su jednostavna aritmetika. Izjednačavajući koeficijente uz t^n s leve i desne strane dobijamo da je

$$\frac{dH_n(x)}{dx} = 2nH_{n-1}(x).$$

Drugu rekurentnu relaciju dokazaćemo polazeći od reprezentacije Hermite-ovih polinoma:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}.$$

Diferencirajući gornji izraz po x dobijamo:

$$\frac{H_n(x)}{dx} = (-1)^n \frac{d}{dx} \left(e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \right) = (-1)^n 2x e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} + (-1)^n e^{x^2} \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x^2}$$

što možemo da prepíšemo

$$\frac{H_n(x)}{dx} = 2xH_n(x) - H_{n+1}(x)$$

Ako iskoristimo prethodni identitet imamo da je

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x).$$

2.5 U prethodnom zadatku smo dokazali rekurentne veze:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x), \quad H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x).$$

a) Kombinujući ove dve jednakosti, dobijamo najpre

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - H'_n(x).$$

Diferenciranjem, ova jednakost postaje

$$H'_{n+1}(x) = 2H_n(x) + 2xH'_n(x) - H''_n(x).$$

Ako u $H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$ zamenimo n sa $n+1$, prethodna jednakost postaje tražena jednačina:

$$H''_n(x) - 2xH'_n(x) + 2nH_n(x) = 0.$$

b) Poslednju jednačinu možemo da napišemo u formi:

$$e^{x^2} \left(H''_n(x) e^{-x^2} - 2x e^{-x^2} H'_n(x) \right) + 2nH_n(x) = 0 \Rightarrow e^{x^2} \frac{d}{dx} \left(H'_n(x) e^{-x^2} \right) + 2nH_n(x) = 0.$$

Zamenimo li indeks n sa m dobijamo da važi

$$e^{x^2} \frac{d}{dx} \left(H'_m(x) e^{-x^2} \right) + 2mH_m(x) = 0.$$

Ovu jednačinu pomnožimo da polinomom $H_n(x)$, a prethodnu sa $H_m(x)$ pa tako dobijene jednačine oduzmemo:

$$e^{x^2} \left(H_m(x) \frac{d}{dx} \left(H'_n(x) e^{-x^2} \right) - H_n(x) \frac{d}{dx} \left(H'_m(x) e^{-x^2} \right) \right) + 2(n-m)H_n(x)H_m(x) = 0,$$

odnosno

$$2(n-m)H_n(x)H_m(x)e^{-x^2} = H_n(x)\frac{d}{dx}\left(H'_m(x)e^{-x^2}\right) - H_m(x)\frac{d}{dx}\left(H'_n(x)e^{-x^2}\right).$$

Primetimo da je

$$H_n(x)\frac{d}{dx}\left(H'_m(x)e^{-x^2}\right) = \frac{d}{dx}\left(H_n(x)H'_m(x)e^{-x^2}\right) - H'_n(x)H'_m(x)e^{-x^2}$$

na osnovu čega je

$$2(n-m)H_n(x)H_m(x)e^{-x^2} = \frac{d}{dx}\left((H_n(x)H'_m(x) - H_m(x)H'_n(x))e^{-x^2}\right).$$

Poslenju jednačinu integralimo od $-\infty$ do ∞ , pa dobijamo

$$2(n-m)\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_m(x)e^{-x^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx}\left((H_n(x)H'_m(x) - H_m(x)H'_n(x))e^{-x^2}\right) dx.$$

Desna strana jednaka je nula

$$\begin{aligned} I_{nm} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx}\left((H_n(x)H'_m(x) - H_m(x)H'_n(x))e^{-x^2}\right) dx \\ &= (H_n(x)H'_m(x) - H_m(x)H'_n(x))e^{-x^2}\Big|_{-\infty}^{\infty} = 0, \end{aligned}$$

zbog dominantnog ponašanja funkcije $\exp(-x^2)$ u $\pm\infty$. Zato je i

$$2(n-m)\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_m(x)e^{-x^2} dx = 0,$$

na osnovu čega odmah zaključujemo da je za $n \neq m$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_m(x)e^{-x^2} dx = 0.$$

Sad treba da izračunamo koliko je

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_n(x)e^{-x^2} dx$$

Podimo od onoga što smo malopre dokazali

$$I_{n-1,n+1} = 0 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_{n-1}(x)H_{n+1}(x) dx = 0.$$

Koristeći prvu rekurentnu relaciju, izrazimo $H_{n+1}(x)$ i dobijamo

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} 2xH_{n-1}(x)H_n(x) dx - 2n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_{n-1}(x)H_{n-1}(x) dx.$$

U drugom sabirku prepoznamo I_{n-1} pa možemo da napišemo da je

$$2n I_{n-1} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} 2x H_{n-1}(x) H_n(x) dx.$$

Setimo se da je

$$H_n = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}.$$

Zbog toga je integral s desne strane

$$2n I_{n-1} = - \int_{-\infty}^{\infty} e^{x^2} 2x \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} dx.$$

Razmotrimo deo podintegralne funkcije:

$$e^{x^2} 2x \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2} = \frac{d}{dx} e^{x^2} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2} = \frac{d}{dx} \left(e^{x^2} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2} \right) - e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2},$$

pa dalje imamo

$$2n I_{n-1} = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} \left(e^{x^2} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2} \right) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} dx + \int_{-\infty}^{\infty} e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} dx.$$

Prvi integral s desne strane jednakosti računamo koristeći metod parcijalne integracije:

$$\begin{aligned} PI &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} \left(e^{x^2} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2} \right) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} dx \\ &= - \left. e^{x^2} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \right|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} e^{x^2} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2} \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x^2} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{x^2} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2} e^{-x^2} e^{x^2} \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x^2} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} H_{n-1}(x) H_{n+1}(x) e^{-x^2} dx = I_{n-1, n+1} = 0. \end{aligned}$$

U drugom integralu prepoznamo:

$$DI = \int_{-\infty}^{\infty} (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} e^{-x^2} (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_n(x) e^{-x^2} dx = I_n,$$

pa dobijamo jednostavnu rekurentnu relaciju

$$I_n = 2n I_{n-1}.$$

Oдавde vidimo da je

$$I_n = 2n I_{n-1} = 2n 2(n-1) I_{n-2}, \Rightarrow I_n = 2n 2(n-1) \dots 2I_0 = 2^n n! I_0.$$

Potrebno je još samo da odredimo vrednost interala I_0

$$I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} H_0(x)H_0(x)e^{-x^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$$

jer je $H_0(x) = 1$. Potražimo koliko je I_0^2 :

$$\begin{aligned} I_0^2 &= I_0 I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2-y^2} dx dy = \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} e^{-\rho^2} \rho d\rho d\varphi \\ &= \int_0^{\infty} e^{-\rho^2} \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi = -\frac{1}{2} e^{-\rho^2} \Big|_0^{\infty} \varphi \Big|_0^{2\pi} = \pi. \end{aligned}$$

Ovde smo najpre dvostruki integral napisali preko cilindričnih koordinata a onda izvršili navedene integracije. Prema tome, imamo da je $I_0 = \sqrt{\pi}$, pa je konačno

$$I_n = 2^n n! \sqrt{\pi}.$$

Relacije ortonormiranosti Hermitovih polinoma možemo zapisati u jedinstvenoj formi

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_m(y)e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm}.$$

2.6 Svojstvena funkcija n -tog svojstvenog stanja je

$$\psi_n(\xi) = A_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2},$$

gde je A_n normalizacioni faktor određen u zadatku 2.2.

a) Potražimo li izvod svojstvene funkcije, dobijamo

$$\begin{aligned} \psi'_n(\xi) &= A_n H'_n(\xi) e^{-\xi^2/2} - A_n H_n(\xi) \xi e^{-\xi^2/2} \\ &= A_n 2n H_{n-1}(\xi) e^{-\xi^2/2} - A_n \left(\frac{1}{2} H_{n+1} + n H_{n-1} \right) e^{-\xi^2/2} \\ &= n A_n H_{n-1} e^{-\xi^2/2} - \frac{1}{2} A_n H_{n+1} e^{-\xi^2/2} \\ &= n \frac{A_n}{A_{n-1}} \psi_{n-1}(\xi) - \frac{1}{2} \frac{A_n}{A_{n+1}} \psi_{n+1}(\xi). \end{aligned}$$

Ovde su iskorišćene rekurentne veze između Hermite-ovih polinoma. Dalje je

$$\frac{A_n}{A_{n-1}} = \sqrt{\frac{2^{n-1} (n-1)!}{2^n n!}} = \frac{1}{\sqrt{2n}}, \quad \frac{A_n}{A_{n+1}} = \sqrt{\frac{2^{n+1} (n+1)!}{2^n n!}} = \sqrt{2(n+1)},$$

pa konačno dobijamo

$$\psi'_n(\xi) = \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(\xi) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(\xi).$$

b) Zbog rekurentne veze Hermite-ovih polinoma imamo

$$\begin{aligned}\xi\psi_n(\xi) &= A_n\xi H_n(\xi)e^{-\xi^2/2} \\ &= A_n\left(\frac{1}{2}H_{n+1} + nH_{n-1}\right)e^{-\xi^2/2} \\ &= \frac{1}{2}\frac{A_n}{A_{n+1}}\psi_{n+1}(\xi) + n\frac{A_n}{A_{n-1}}\psi_{n-1}(\xi),\end{aligned}$$

pa je onda

$$\xi\psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(\xi) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(\xi).$$

2.7 Očekivana vrednost kinetičke energije jednaka je

$$\langle T \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} \right) dx.$$

Na prvi pogled, deluje da se ovaj zadatak svodi na izračunavanje integrala. Međutim, stvari se mogu uprostiti ako se koriste osobine talasnih funkcija, koje su posledice relacija između Hermite-ovih polinoma. Pri računanju $\langle T \rangle$ najpre ćemo izvršiti parcijalnu integraciju

$$\langle T \rangle = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\psi_n(x) \frac{d\psi_n(x)}{dx} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\psi_n(x)}{dx} \right)^2 dx \right).$$

Prvi sabirak je 0, jer je vrednost talasne funkcije $\psi_n(x)$ na krajevima intervala (u $x = \pm\infty$) jednaka nula. Dakle, treba izračunati

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} (\psi'_n(x))^2 dx.$$

U prethodnom zadatku smo pokazali da je

$$\psi'_n(\xi) = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(\xi) - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(\xi).$$

Podsetimo se da je bezdimenzioni parametar $\xi = x\sqrt{m\omega/\hbar}$, tako da je

$$\frac{d\psi_n(\xi)}{d\xi} = \frac{dx}{d\xi} \frac{d\psi_n(x)}{dx} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d\psi_n(x)}{dx},$$

pa imamo

$$\frac{d\psi_n(x)}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(x) - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(x) \right),$$

Dalje je

$$\begin{aligned}\langle T \rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{m\omega}{\hbar} \left(\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(x) - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(x) \right)^2 dx \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{n}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_{n-1}(x))^2 dx + \frac{n+1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_{n+1}(x))^2 dx - \sqrt{n(n+1)} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(x)\psi_{n+1}(x) dx \right)\end{aligned}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Ovde je iskorišćeno da talasne funkcije $\psi_n(x)$ čine ortonormiran bazis

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) \psi_m(x) dx = \delta_{nm}.$$

Na isti način, računa se i očekivana vrednost $\langle U \rangle$,

$$\langle U \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi_n(x) dx = \frac{m\omega^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (x \psi_n(x))^2 dx.$$

Koristeći drugi identitet iz prethodnog zadatka **2.6**, imamo da je

$$x\psi_n(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left(\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right)$$

Pomoću ovog identiteta nalazimo:

$$\langle U \rangle = \frac{m\omega^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar}{m\omega} \left(\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right)^2 dx.$$

Slično kao u prethodnom delu ovog zadatka, dobijamo da je

$$\langle U \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Sad lako određujemo i očekivanu vrednost energije

$$\langle E \rangle = \langle T + U \rangle = \langle T \rangle + \langle U \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

što je očekivan rezultat, jer je energija čestice u stanju ψ_n jednaka $\hbar\omega(n + 1/2)$.

2.8 Svojevredna stanja harmonijskog oscilatora su $\psi_n(x)$ dok su odgovarajuće svojevredne vrednosti $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$. Evolucija stanja je

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(x).$$

Koeficijenti c_n se određuju na osnovu početnog uslova. Stavimo u prethodnu jednačinu $t = 0$ i tada je

$$\Psi(x, t = 0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x).$$

Koeficijenti c_n mogu se dobiti korišćenjem uslova ortogonalnosti talasnih funkcija, mada ih je nekad moguće odrediti još lakše.

a) U našem slučaju vidimo da je

$$c_0 = 0, \quad c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_2 = \frac{i}{\sqrt{2}}, \quad c_3 = c_4 = \dots = 0.$$

Prema tome, u proizvoljnom trenutku t talasna funkcija je

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{3i}{2}\omega t} \psi_1(x) + \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-\frac{5i}{2}\omega t} \psi_2(x).$$

Gustina verovatnoće je

$$\begin{aligned} |\Psi(x, t)|^2 &= \Psi(x, t)^* \Psi(x, t) \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{3i}{2}\omega t} \psi_1(x) - \frac{i}{\sqrt{2}} e^{\frac{5i}{2}\omega t} \psi_2(x) \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{3i}{2}\omega t} \psi_1(x) + \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-\frac{5i}{2}\omega t} \psi_2(x) \right) \\ &= \frac{1}{2} \psi_1(x)^2 + \frac{i}{2} \psi_1(x) \psi_2(x) e^{-i\omega t} - \frac{i}{2} \psi_1(x) \psi_2(x) e^{i\omega t} + \frac{1}{2} \psi_2(x)^2 \\ &= \frac{1}{2} (\psi_1(x)^2 + \psi_2(x)^2 + 2\psi_1(x) \psi_2(x) \sin(\omega t)). \end{aligned}$$

Ovde je iskorišćeno

$$\sin(\omega t) = \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i},$$

što je posledica dobro poznate Euler-ove jednakosti

$$e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha.$$

b) Očekivana vrednost koordinate $\langle x \rangle$ u stanju $\psi(x, t)$ je definisana izrazom

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_{\Psi(x, t)} &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t)^* x \Psi(x, t) dx \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (x\psi_1(x)^2 + x\psi_2(x)^2 + 2x\psi_1(x)\psi_2(x) \sin(\omega t)) dx \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} x\psi_1(x)^2 dx + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} x\psi_2(x)^2 dx + \sin(\omega t) \int_{-\infty}^{\infty} x\psi_1(x)\psi_2(x) dx. \end{aligned}$$

Ove integrale možemo da izračunamo na različite načine. Prva dva integrala su jednaka nuli, jer je podintegralna funkcija neparna funkcija, a integralimo u simetričnom intervalu. Treći integral možemo da odredimo neposredno, mada, lakše je koristiti relacije između svojstvenih stanja harmonijskog oscilatora

$$x\psi_1(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \psi_0(x) + \psi_2(x) \right),$$

pa je treći integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\psi_1(x)\psi_2(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \psi_0(x) + \psi_2(x) \right) \psi_2(x) dx = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

Ovde smo koristili ortogonalnost svojstvenih funkcija harmonijskog oscilatora. Dakle, očekivana vrednost položaja čestice je

$$\langle x \rangle_{\Psi(x, t)} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sin(\omega t).$$

2.9 Označimo sa M , L i T jedinicu mase, dužine i vremena. Preko njih izražavamo dimenzije od m , ω i \hbar

$$[m] = M, \quad [\omega] = T^{-1}, \quad [\hbar] = ML^2 T^{-1}.$$

S druge strane, dimenzije karakteristične dužine, impulsa i energije su

$$[x_0] = L, \quad [p_0] = MLT^{-1}, \quad [E] = ML^2 T^{-2}$$

Ako je $x_0 = m^a \omega^b \hbar^c$, nepoznate konstante a , b i c se mogu odrediti iz uslova da su dimenzija leve i desne strane jednake. Stoga imamo:

$$L = M^a T^{-b} M^c L^{2c} T^{-c}.$$

Izjednačavajući stepene od L , M i T s leve i desne strane jednakosti imamo

$$1 = 2c, \quad 0 = a + c, \quad 0 = b + c.$$

Rešenje ovog sistema je $a = -1/2$, $b = -1/2$, $c = 1/2$, tako da dimenziona analiza daje

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

Na isti način se dobija da su

$$p_0 = \sqrt{m\hbar\omega}, \quad E = \hbar\omega.$$

Ovo je jednostavan postupak i mada on zanemaruje mnoge detalje, daje dobru procenu skale na kojoj se odigrava fizika koju opisujemo.

2.10 Potencijalna energija za $x < 0$ je beskonačna, što znači da je rešenje Schrödinger-ove jednačine u toj oblasti $\psi = 0$, dok je za $x > 0$ potencijal kao kod harmonijskog oscilatora. Zbog sličnosti sa harmonijskim oscilatorom, zadatak bismo mogli da radimo na istovetan način kao što smo tražili rešenje u slučaju harmonijskog oscilatora, ali problem možemo da rešimo i jednostavnije ako iskoristimo rešenje koje smo dobili za harmonijski oscilator. Naime, videli smo da su svojstvene funkcije harmonijskog oscilatora

$$\psi_n(x) = B_n H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2},$$

dok je spektar diskretan $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$. Hermite-ovi polinomi H_n koji se pojavljuju u ovom rešenju određuju da li je svojstvena funkcija parna ili je neparna. Rešenja za $n = 0, 2, 4, \dots$ su parna, dok su rešenja za $n = 1, 3, 5, \dots$ neparna. Da bismo dobili neprekidno rešenje koje zadovoljava Schrödinger-ovu jednačinu za potencijal definisan u ovom zadatku, potrebna su nam rešenja koja imaju osobinu da je vrednost talasne funkcije u $x = 0$ nula. Takve su neparne funkcije. Stoga su rešenja u oblasti $x > 0$ funkcije

$$\psi_n^+(x) = C_{2n+1} H_{2n+1} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}.$$

Ovde su C_{2n+1} konstante normiranja. Za njih važi

$$\begin{aligned} C_{2n+1}^2 \int_0^{\infty} H_{2n+1}^2 \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx &= 1 \Rightarrow C_{2n+1}^2 \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} H_{2n+1}^2 \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = 1 \\ &\Rightarrow C_{2n+1}^2 2^{2n} (2n+1)! \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1, \end{aligned}$$

pa su talasne funkcije

$$\psi_n(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{2^n \sqrt{(2n+1)!}} H_{2n+1} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}, & x > 0 \end{cases}.$$

Odgovarajuće energije su

$$E_n = \hbar\omega \left(2n + \frac{3}{2} \right),$$

gde je kvantni broj $n = 0, 1, 2, \dots$

2.11 Stanje sistema u nekom trenutku t je opisano sledećom funkcijom:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(x),$$

gde je za harmonijski oscilator $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$. Iz toga sledi da se stanje može napisati:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} \psi_n(x) = e^{-\frac{i}{2}\omega t} \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-in\omega t} \psi_n(x).$$

Ako pogledamo vremensku zavisnost ovog izraza od vremena t , vidimo da je prvi sabirak konstantan, dok su ostali članovi u sumi periodične funkcije s periodom $T_n = 2\pi/(n\omega)$, a to je n puta kraće od klasičnog perioda $T = 2\pi/\omega$. Dakle, čitava suma je periodična s periodom $T = 2\pi/\omega$. Nakon perioda T , talasna funkcija se promeni na sledeći način

$$\Psi(x, t + T) = e^{-\frac{i}{2}\omega(t+T)} \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-in\omega t} \psi_n(x) = e^{-\frac{i}{2}\omega T} \Psi(x, t).$$

Gustina verovatnoće nakon vremena T se ne menja jer je

$$|\Psi(x, t + T)|^2 = |e^{-\frac{i}{2}\omega T}|^2 |\Psi(x, t)|^2 = |\Psi(x, t)|^2.$$

Norma faznog faktora $\exp(-i\omega T/2)$ je 1, jer je

$$\left| e^{-\frac{i}{2}\omega T} \right|^2 = e^{-\frac{i}{2}\omega T} e^{\frac{i}{2}\omega T} = 1.$$

Prema tome, nakon klasičnog perioda T talasna funkcija se promeni za fazni faktor, a gustina verovatnoće se ne promeni.

2.12 Stanje čestice u početnom trenutku možemo da napišemo preko bezdimenzionog parametra $\xi = x\sqrt{m\omega/\hbar}$:

$$\Psi(\xi, t = 0) = A(1 + \xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}.$$

a) Lako prepoznamo da se gornja talasna funkcija linearna kombinacija osnovnog $\psi_0(\xi)$ i prvog pobuđenog stanja $\psi_1(\xi)$

$$\psi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad \psi_1(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \sqrt{2\xi} e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

tako da je u početnom trenutku:

$$\Psi(\xi, t = 0) = A\sqrt[4]{\pi}\psi_0(\xi) + A\sqrt[4]{\pi}\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(\xi).$$

Dalja evolucija ovog stanja je opisana jednačinom:

$$\begin{aligned}\Psi(\xi, t) &= A\sqrt[4]{\pi}\psi_0(\xi)e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t} + A\sqrt[4]{\pi}\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t}\psi_1(\xi) \\ &= A\sqrt[4]{\pi}\psi_0(\xi)e^{-\frac{i}{2}\omega t} + A\sqrt[4]{\pi}\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{3i}{2}\omega t}\psi_1(\xi),\end{aligned}$$

jer su $E_0 = \hbar\omega/2$ i $E_1 = 3\hbar\omega/2$. Ako napišemo talasnu funkciju preko x imaćemo:

$$\Psi(x, t) = A\sqrt[4]{\pi}e^{-\frac{i}{2}\omega t}\psi_0(x) + A\sqrt[4]{\pi}\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{3i}{2}\omega t}\psi_1(x) = A\left(e^{-\frac{i}{2}\omega t} + x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}e^{-\frac{3i}{2}\omega t}\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

b) U trenutku $t = T$ talasna funkcija je

$$\Psi(x, t = T) = A\left(e^{-\frac{i}{2}\omega T} + x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}e^{-\frac{3i}{2}\omega T}\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Da bi se sistem vratio u isto početno stanje, potrebno je da bude

$$\frac{\omega T}{2} = 2n_1\pi, \quad \frac{3\omega T}{2} = 2n_2\pi,$$

gde su n_1 i n_2 prirodni brojevi. Najkraće vreme kada su oba uslova ispunjena je

$$T = \frac{4\pi}{\omega}$$

c) Talasna funkcija u trenutku $t = \tau$ je

$$\Psi(x, t = \tau) = A\left(e^{-\frac{i}{2}\omega\tau} + x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}e^{-\frac{3i}{2}\omega\tau}\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} = Ae^{-\frac{i}{2}\omega\tau}\left(1 + x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}e^{-i\omega\tau}\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Da bismo dobili traženi oblik stanja, potrebno je da bude

$$e^{-i\omega\tau} = -1 \Rightarrow \omega\tau = \pi \Rightarrow \tau = \frac{\pi}{\omega}.$$

Konstanta B je

$$B = Ae^{-\frac{i}{2}\omega\tau} = Ae^{-\frac{i\pi}{2}} = -iA.$$

2.13 Ovo je prvi zadatak u kome imamo da se čestica kreće u dve dimenzije, pa ćemo malo više pažnje posvetiti ovakvoj vrsti problema. Schrödinger-ova jednačina je

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \alpha m\omega^2y^2\right)\psi(x, y) = E\psi(x, y).$$

Ovo je parcijalna diferencijalna jednačina drugog reda. Prvi i treći sabirak sa leve strane zavise od koordinate x dok drugi i četvrti zavise od y . U takvim slučajevima kažemo da je Schrödinger-ova jednačina separabilna. Tad možemo da razdvojimo promenljive i da rešenje potražimo u obliku proizvoda $\psi(x, y) = \psi(x)\psi(y)$. Kad ubacimo pretpostavljeno rešenje, Schrödinger-ova jednačina postaje

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

Ovde smo iskoristili činjenicu da parcijalni izvod po x (odnosno y) ne deluje na funkciju koja zavisi od y (odnosno x). Takođe, kada deluje na funkciju jedne promeneljive, parcijalni izvod postaje običan izvod. Rešavamo dalje jednačinu tako što je podelimo sa $\psi(x)\psi(y)$:

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

Ako pažljivo pogledamo poslednju jednačinu, videćemo da prva dva sabirka sa leve strane zavise od koordinate x , tako da čine neku funkciju od x , nazovimo je $f(x)$. Slično tome, preostala dva sabirka sa leve strane jednačinu zavise samo od y pa ih možemo zameniti sa funkcijom $g(y)$. Desna strana jednakosti je konstantna, pa je jednačina oblika

$$f(x) + g(y) = E = \text{const.}$$

Funkcije $f(x)$ i $g(y)$ su konstantne, što lako vidimo iz sledećeg rezonovanja. Iz prethodne jednačine je $f(x) = E - g(y)$. Izvod desne strane po x je nula, pa mora biti nula i izvod leve strane po x . Ako je $df(x)/dx = 0$, onda je $f(x) = \text{const} = E_x$. Isto tako je $g(y) = \text{const} = E_y$. Pored toga, važi da je

$$E_x + E_y = E.$$

Na ovu jednačinu vratićem se kasnije. Primitimo da smo dobili da se parcijalna diferencijalna jednačina svodi na dve obične diferencijalne jednačine:

$$f(x) = -\frac{1}{\psi(x)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 = E_x, \quad g(y) = -\frac{1}{\psi(y)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(y)}{dy^2} + \alpha m\omega^2 y^2 = E_y.$$

One su slične pa ćemo rešiti prvu od njih, a rešenje druge ćemo dobiti po analogiji. Prvu jednačinu pomnožimo sa $\psi(x)$ i ona postaje

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi(x) = E_x \psi(x),$$

a to je dobro poznata jednačina, Schrödinger-ova jednačina za jednodimenzioni harmonijski oscilator mase m i sopstvene frekvencije ω . Svojtstvene funkcije i svojtstvene energije su nam poznate. Dakle, gornja jednačina ima rešenje ako je energija kvantovana, pa je $E_x = E_{n_x} = \hbar\omega(n_x + 1/2)$, gde je $n_x = 0, 1, 2, \dots$ kvantni broj koji prebrojava odgovarajuća svojtstvena stanja. Druga jednačina se svodi na

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(y)}{dy^2} + \alpha m\omega^2 y^2 \psi(y) = E_y \psi(y).$$

I ovo je Schrödinger-ova jednačina harmonijskog oscilatora u jednoj dimenziji, mase m i sopstvene frekvencije $\omega_y = \omega\sqrt{2\alpha}$. Stoga je $E_y = E_{n_y} = \hbar\omega\sqrt{2\alpha}(n_y + 1/2)$ pri čemu je $n_y = 0, 1, 2, \dots$. Dakle, energija sistema je takođe kvantovana i važi:

$$E_{n_x, n_y} = E_x + E_y = \hbar\omega \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega\sqrt{2\alpha} \left(n_y + \frac{1}{2} \right).$$

Ako je $\alpha = 1$ energije su:

$$E_{n_x, n_y} = \hbar\omega \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega\sqrt{2} \left(n_y + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(n_x + n_y\sqrt{2} + \frac{1+\sqrt{2}}{2} \right).$$

i spektar je nedegenerisan, jer ne postoje dva različita prirodna broja n_x i n_x za koje je izraz $n_x + \sqrt{2}n_y$ jednak (jer je $\sqrt{2}$ iracionalan broj i ne može da se napiše u obliku razlomka). S druge strane, kada je $\alpha = 2$, spektar je degenerisan, jer je

$$E_{n_x, n_y} = \hbar\omega \left(n_x + 2n_y + \frac{3}{2} \right)$$

a to znači da postoje različita stanja s istom energijom (na primer, stanje sa kvantni brojevima $(n_x = 0, n_y = 1)$ i $(n_x = 2, n_y = 0)$ imaju istu energiju).

2.14 Potencijalnu energiju čestice možemo napisati

$$U = \frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(x+a)^2 = m\omega^2x^2 + m\omega^2a^2.$$

Prvi sabirak je kvadratičan i on odgovara harmonijskom oscilatoru, dok je drugi član konstantan, tako da samo menja energiju za konstantan iznos. Schrödinger-ova jednačina za česticu za ovakvu potencijalnu energiju je

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + m\omega^2x^2 + m\omega^2a^2 \right) \psi(x) = E\psi(x).$$

Ako je prepíšemo na sledeći način

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + m\omega^2x^2 \right) \psi(x) = (E - m\omega^2a^2) \psi(x).$$

Ovde prepoznamo harmonijski oscilator. Uvedimo nove oznake za masu $M = m$, frekvenciju $\Omega = \sqrt{2}\omega$ i energiju $\epsilon = E - m\omega^2a^2$. Preko novih oznaka, prethodna jednačina se prepisuje

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}M\Omega^2x^2 \right) \psi(x) = \epsilon\psi(x),$$

a to je standardna jednačina harmonijskog oscilatora. Osnovno stanje je

$$\psi_0 = \sqrt[4]{\frac{M\Omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{M\Omega}{2\hbar}x^2\right) = \sqrt[4]{\frac{\sqrt{2}m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{\sqrt{2}m\omega}{2\hbar}x^2\right),$$

dok je energija osnovnog stanja

$$\epsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\Omega \Rightarrow E_0 - m\omega^2a^2 = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\omega \Rightarrow E_0 = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\omega + m\omega^2a^2.$$

Očekivana vrednost koordinate $\langle x \rangle$ u osnovnom stanju je

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2 x dx = \sqrt{\frac{\sqrt{2}m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\sqrt{2}m\omega}{\hbar}x^2\right) x dx = 0$$

jer je podintegralna funkcija antisimetrična.

2.15 Po uslovu zadatka $\psi_1(x)$ i $\psi_2(x)$ su rešenja vremenski nezavisne Schrödinger-ove jednačine za energiju E . To znači da je

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \psi_1(x) = E\psi_1(x), \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \psi_2(x) = E\psi_2(x).$$

Treba da pokažemo da je linearna kombinacija ovih rešenja takođe rešenje Schrödinger-ove jednačine. Linearna kombinacija rešenja je $\alpha_1\psi_1(x) + \alpha_2\psi_2(x)$ gde su α_1 i α_2 neki kompleksni brojevi. Pogledajmo koju jednačinu zadovoljava linearna kombinacija rešenja:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right)(\alpha_1\psi_1(x) + \alpha_2\psi_2(x)) = \\ & = \alpha_1\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right)\psi_1(x) + \alpha_2\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right)\psi_2(x) \\ & \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right)(\alpha_1\psi_1(x) + \alpha_2\psi_2(x)) = \alpha_1 E\psi_1(x) + \alpha_2 E\psi_2(x), \\ & \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right)(\alpha_1\psi_1(\vec{r}) + \alpha_2\psi_2(\vec{r})) = E(\alpha_1\psi_1(\vec{r}) + \alpha_2\psi_2(\vec{r})), \end{aligned}$$

što znači da je $\alpha_1\psi_1(x) + \alpha_2\psi_2(x)$ rešenje Schrödinger-ove jednačine za svojstvenu energiju E .

2.16 Diferencijalnu jednačinu

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) u(r) = 0$$

ćemo najpre prepisati u "bezdimezionoj" formi. Uvedimo novu koordinatu

$$\rho = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} r$$

onda je

$$\frac{d}{dr} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d}{d\rho}, \quad \frac{d^2}{dr^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{d\rho^2}$$

pa se jednačina nakon skraćivanja svodi na

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left(\frac{2E}{m\omega} - \rho^2 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u(\rho) = 0.$$

Ovu jednačinu ćemo najpre rešiti u asimptotskim oblastima kada r (a time i ρ) teže ka nuli, odnosno beskonačnosti. Kada $\rho \rightarrow 0$ dominantan član u velikoj zagradi je $1/\rho^2$ pa se u blizini nule jednačina svodi na

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u(\rho) = 0.$$

Rešenje tražimo u obliku $u(\rho) = \rho^\alpha$ i dobijamo da je

$$\alpha^2 - \alpha = l(l+1) \Rightarrow \alpha = l+1.$$

Prvo rešenje smo odbacili jer je r^{-l} divergentna funkcija kada $\rho \rightarrow 0$. Dakle, za male ρ funkcija $u(\rho)$ se ponaša kao

$$u(\rho) = \rho^{l+1}.$$

S druge strane, za $\rho \rightarrow +\infty$ dominantan član u velikoj zagradi je ρ^2 , pa se polazna jednačina svodi na

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} - \rho^2 u(\rho) = 0.$$

Rešenje ove jednačine tražimo u obliku $u(\rho) = e^{\beta\rho^2}$ gde je β konstanta koju ćemo odrediti. Pošto je

$$\frac{d}{d\rho} e^{\beta\rho^2} = 2\beta\rho e^{\beta\rho^2}, \quad \frac{d^2}{d\rho^2} e^{\beta\rho^2} = (2\alpha + 4\beta^2\rho^2) e^{\beta\rho^2} \sim 4\beta^2\rho^2 e^{\beta\rho^2},$$

jer je $\rho \gg \beta$. Dakle,

$$4\beta^2 = 1 \Rightarrow \beta = \frac{1}{2}, \beta = -\frac{1}{2}.$$

Rešenje $\exp(\rho^2/2)$ je divergentno pa smo to rešenje odbacili. Prema tome za velike ρ talasna funkcija treba da ima oblik

$$u(\rho) = e^{-\rho^2/2}.$$

Potražimo sad rešenje za bilo koje ρ . Rešenja koja smo našli u asimptotskim oblastima sugerišu da ga pretpostavimo u obliku:

$$u(\rho) = e^{-\rho^2/2} \rho^{l+1} v(\rho).$$

Ovde je $v(\rho)$ analitička funkcija koju ćemo odrediti. Potražimo jednačinu koju zadovoljava funkcija $v(\rho)$. Drugi izvod od funkcije $u(\rho)$ je sad

$$u''(\rho) = e^{-\rho^2/2} \rho^{l+1} \left(v''(\rho) + \left(\frac{2(l+1)}{\rho} - 2\rho \right) v'(\rho) + \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} - (2l+3) + \rho^2 \right) v(\rho) \right),$$

tako da $v(\rho)$ zadovoljava diferencijalnu jednačinu

$$v''(\rho) + \left(\frac{2(l+1)}{\rho} - 2\rho \right) v'(\rho) + \left(\frac{2E}{m\omega} - (2l+3) \right) v(\rho) = 0.$$

Rešenje ove jednačine tražimo u obliku razvoja u Taylor-ov red

$$v(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k.$$

Pretpostavljeno rešenje svodi gornju jednačinu na

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k k(k-1) \rho^{k-2} + (2l+1) \sum_{k=0}^{\infty} c_k k \rho^{k-2} - 2 \sum_{k=0}^{\infty} c_k k \rho^k + \left(\frac{2E}{m\omega} - (2l+3) \right) \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k = 0.$$

Prva dva sabirka u prvoj sumi su jednaki 0, isto kao što je i prvi sabirak u drugoj sumi nula. Ako to primetimo, a onda pomerimo indeks sumiranja za 2 u prve dve sume, imaćemo

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_{k+2} (k+2)(k+1) \rho^k + (2l+1) \sum_{k=0}^{\infty} c_{k+2} (k+2) \rho^k + (2l+1) c_1 \frac{1}{\rho} - 2 \sum_{k=0}^{\infty} c_k k \rho^k + \left(\frac{2E}{m\omega} - (2l+3) \right) \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k = 0,$$

što se može napisati kao

$$c_1 (2l+1) \frac{1}{\rho} + \sum_{k=0}^{\infty} \left(c_{k+2} ((k+2)(k+1) + (2l+1)(k+2)) + c_k \left(\frac{2E}{m\omega} - 2k - (2l+3) \right) \right) \rho^k = 0.$$

Koeficijenti uz sve stepene od ρ su jednaki 0, jer je desna strana 0. Zato je

$$c_1 = 0, \quad c_{k+2} ((k+2)(k+1) + (2l+1)(k+2)) + c_k \left(\frac{2E}{m\omega} - 2k - (2l+3) \right) = 0.$$

Prvi zaključak sledi jer je $2l + 1 \neq 0$ (l je nenegativna ceo broj), a iz drugog dobijamo rekurentnu relaciju

$$c_{k+2} = \frac{2k + 2l + 3 - \frac{2E}{m\omega}}{(k+2)(k+1) + (2l+1)(k+2)} c_k.$$

Iz $c_1 = 0$ i rekurentne veze vidimo da su svi neparni koeficijenti $c_1 = c_3 = c_5 = \dots = c_{2n+1} = 0$. Parni članovi nisu 0 i mogu se izraziti preko c_2 .

$$c_{2(k+1)} = \frac{4k + 2l + 3 - \frac{2E}{m\omega}}{(2k+2)(2k+1) + (2l+1)(k+2)} c_{2k}$$

Ova rekurentna relacija daje i asimptotsko ponašanje koeficijenata u razvoju za velike k jer je

$$c_{2(k+1)} \sim \frac{4k}{2k \cdot 2k} c_{2k} \Rightarrow c_{2k} \sim \frac{1}{k!},$$

pa je

$$v(\rho) \sim \sum_{k=0}^{\infty} c_{2k} \rho^{2k} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \rho^{2k} = e^{\rho^2},$$

a to je rešenje koje nismo hteli, jer to znači da je

$$u(r) = e^{-\rho^2/2} \rho^{l+1} e^{\rho^2} \sim e^{\rho^2/2},$$

što je divergentno rešenje koje ne zadovoljava granični uslov u $\rho \rightarrow \infty$. Da bi se taj uslov ispunio, potrebno je da se niz negde prekine, odnosno da postoji neko konačno k za koje je

$$2k + 2l + 3 - \frac{2E}{m\omega} = 0,$$

što znači da je energija kvantovana

$$E_n = \hbar\omega \left(\underbrace{k+l}_{n} + \frac{3}{2} \right) = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right),$$

gde smo uveli nov broj n koji prebrojava stanja energije i uzima vrednosti $0, 1, 2, \dots$

2.17 Ovde je dato rešenje vremenski zavisne Schrödinger-ove jednačine

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \Psi(x, t).$$

Na osnovu poznatog rešenja, možemo da nađemo potencijal u kome se čestica nalazi. Naime, pošto je

$$i \frac{\partial}{\partial t} C \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2} - i \frac{\hbar}{2mb^2} t\right) = C \frac{\hbar}{2mb^2} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2} - i \frac{\hbar}{2mb^2} t\right),$$

i

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} C \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2} - i \frac{\hbar}{2mb^2} t\right) = C \frac{x^2 - b^2}{b^4} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2} - i \frac{\hbar}{2mb^2} t\right),$$

polazna jednačina postaje

$$C \frac{\hbar^2}{2mb^2} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2} - i \frac{\hbar}{2mb^2} t\right) = C \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2} - i \frac{\hbar}{2mb^2} t\right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{x^2 - b^2}{b^4} + U(x) \right).$$

Kad pojednostavimo ovaj izraz dobijamo

$$U(x) = \frac{\hbar^2}{2mb^4} x^2.$$

Dakle, ovde se radi o harmonijskom oscilatoru.

2.18 Talasna funkcija je normirana, što znači da je

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1.$$

Stanje čestice je opisano normiranom talasnom funkcijom $\psi(x) = f(x)e^{ik_0x}$, gde je $f(x)$ realna funkcija realne promenljive i k_0 konstanta.

a) Zato je

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_0x} f(x) e^{ik_0x} f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)^2 dx.$$

Prema tome, traženi integral ima vrednost 1.

b) Očekivana vrednost impulsa čestice je

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_0x} f(x) \left(ik_0 e^{ik_0x} f(x) + e^{ik_0x} \frac{df(x)}{dx} \right) dx \\ &= \hbar k_0 \int_{-\infty}^{\infty} f(x)^2 dx - i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{df(x)}{dx} dx. \end{aligned}$$

Prvi integral je 1 zbog prethodnog dela zadatka, a drugi integral je 0. To može da se pokaže na sledeći način:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{df(x)}{dx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \frac{d}{dx} f(x)^2 dx = \frac{1}{2} f(x)^2 \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0.$$

Iz prethodnog dela zadatka smo zaključili da je integral $f(x)^2$ konačan, a da bi to bilo moguće u $\pm\infty$ vrednost funkcije $f(x)^2$ mora biti nula. Prema tome, konačno imamo da je

$$\langle p \rangle = \hbar k_0.$$

2.19 Uslov normiranja jednodimenzione talasne funkcije je

$$\int |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

Desna strana je bezdimenziona veličina, pa vidimo da je dimenzija talasne funkcije

$$[\psi(x)]^2 L = 1 \Rightarrow [\psi(x)] = L^{-1/2}.$$

U dve i tri dimenzije uslovi normiranja su

$$\int |\psi(x, y)|^2 dx dy = 1, \quad \int |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1,$$

pa su dimenzije talasnih funkcija

$$[\psi(x, y)] = L^{-1}, \quad [\psi(x, y, z)] = L^{-3/2}.$$

2.20 U (2.44) je definisana struja verovatnoće kao:

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

Ovaj izraz se može prepisati u obliku

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \frac{1}{2i} (\Psi^* \nabla \Psi - (\Psi^* \nabla \Psi)^*) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^* \nabla \Psi),$$

što je traženi oblik struje verovatnoće. U poslednjem koraku iskorišćeno je $\text{Im } z = (z - z^*)/(2i)$.

2.21 Iskoristićemo izraz za struju verovatnoće dobijen u prethodnom zadatku, koji se u jedno-dimenzionom slučaju svodi na

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^* \nabla \Psi) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \vec{e}_x.$$

U slučaju stacionarnog stanja $\Psi(x, t) = \psi(x) \exp(iEt/\hbar)$ (a sva stanja navedena u ovom zadatku su takva) ova formula se dodatno pojednostavljuje:

$$j = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\psi^*(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{\frac{iEt}{\hbar}} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\psi^*(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right).$$

a) Kada je prostorni deo talasne funkcije jednak $\psi(x) = Ae^{ikx}$ struja je:

$$j = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(A^* e^{-ikx} (ik) A e^{ikx} \right) = \frac{\hbar k |A|^2}{m}.$$

b) U slučaju linearne kombinacije dva ravna talasa, gustina verovatnoće jednaka je

$$\begin{aligned} j &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left((A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx})(ik)(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}) \right) = \\ &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(ik \underbrace{(|A|^2 - |B|^2)}_{\text{realno}} + ik \underbrace{(A^* B e^{-2ikx} - AB^* e^{2ikx})}_{\text{imaginarno}} \right) \\ &= \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2). \end{aligned}$$

c) Lako se vidi da je u ovom slučaju struja verovatnoće jednaka 0:

$$j = \frac{\hbar}{m} \text{Im} (-k|A|^2 \sin(kx) \cos(kx)) = 0.$$

2.22 Vremenski zavisna jednodimenziona Schrödinger-ova jednačina je

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \Psi(x, t).$$

Treba da pokažemo da se kao posledica ove jednačine može dobiti da je

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \langle F \rangle,$$

što je zapravo drugi Newton-ov zakon. Pri tome su očekivane vrednosti impulsa p i sile $F = -dU(x)/dx$:

$$\langle p \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) dx, \quad \langle F \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\partial U}{\partial x} \Psi(x, t) dx.$$

Krenimo od leve strane drugog Newton-ovog zakona

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle p \rangle &= -i\hbar \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} + \Psi^*(x, t) \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t \partial x} \right) dx \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \right) dx\end{aligned}$$

U poslednjem koraku izvršili smo parcijalnu integraciju u drugom integralu.

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t \partial x} dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \right) - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \right) dx \\ &= \cancel{\Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \Big|_{-\infty}^{\infty} \rightarrow 0} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} dx \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} dx,\end{aligned}$$

jer je talasna funkcija na krajevima intervala definisanosti jednaka 0. U izrazu za vremenski izvod očekivane vrednosti impulsa pojavljuju se izvodi po vremenu talasne funkcije $\Psi(x, t)$ i njoj konjugovane funkcije $\Psi^*(x, t)$. Ti izvodi figurišu i u vremenski zavisnoj Schrödinger-ovoj jednačini, koja kad se konjuguje postaje:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \Psi^*(x, t).$$

Dalje imamo

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} + U(x) \Psi^*(x, t) \right) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U(x) \Psi(x, t) \right) \right) dx.\end{aligned}$$

prvi i treći integral su zajedno jednaki 0. Naime,

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \right) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right) dx \\ &= \cancel{\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{\infty} \rightarrow 0},\end{aligned}$$

što se svelo na vrednosti podintegralne funkcije na granicama intervala integracije, a talasna funkcija i njeni prvi izvodi tu su jednaki 0. Ostaju još drugi i četvrti sabirak u podintegralnoj funkciji

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi^*(x, t) U(x) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} U(x) \Psi(x, t) \right) dx$$

$$\begin{aligned}
&= \Psi^*(x, t) U(x) \Psi(x, t) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} U(x) \Psi(x, t) + \Psi^*(x, t) \frac{\partial U(x)}{\partial x} \Psi(x, t) \right) dx \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} U(x) \Psi(x, t) \right) dx \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\partial U(x)}{\partial x} \Psi(x, t) dx,
\end{aligned}$$

Ono što je preostalo prepoznamo kao očekivanu vrednost sile. Time se dobija da je

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \langle F \rangle,$$

što je i trebalo dokazati. Inače ovo tvrđenje se naziva Ehrenfest-ova teorema.

2.23 Ako je $\psi(x)$ rešenje vremenski nezavisne Schrödinger-ove jednačine onda je

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

Kompleksno konjugovanje ove jednačine pokazuje da i $\psi^*(x)$ takođe zadovoljava Schrödinger-ovu jednačinu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*(x)}{\partial x^2} + U(x) \psi^*(x) = E \psi^*(x).$$

To je posledica $U(x)^* = U(x)$ i $E^* = E$ jer su potencijalna energija i energija realna funkcija i realna konstanta. Kad saberemo ove dve jednačine, dobijamo da je

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\psi(x) + \psi^*(x)) + U(x) (\psi(x) + \psi^*(x)) = E (\psi(x) + \psi^*(x)).$$

Dakle, $\psi(x) + \psi^*(x) = 2 \operatorname{Re}(\psi(x))$ zadovoljava Schrödinger-ovu jednačinu, a to je realna funkcija. Prema tome, uvek postoji realno rešenje vremenski nezavisne Schrödinger-ove jednačine. Može se pokazati da postoji još jedna realna funkcija, $i(\psi(x) - \psi^*(x)) = 2 \operatorname{Im}(\psi(x))$, koja zadovoljava Schrödinger-ovu jednačinu.

2.24 Za jednodimenzionu talasnu funkciju fluks verovatnoće je

$$j = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left(\psi^*(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right).$$

Pošto su

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = e^{i\phi(x)} \left(\frac{\rho'(x)}{2\rho(x)} + i\sqrt{\rho(x)}\phi'(x) \right), \quad \psi^*(x) = \sqrt{\rho(x)} e^{-i\phi(x)},$$

dobijamo

$$j = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left(\sqrt{\rho(x)} e^{-i\phi(x)} e^{i\phi(x)} \left(\frac{\rho'(x)}{2\rho(x)} + i\sqrt{\rho(x)}\phi'(x) \right) \right) = \frac{\hbar}{m} \rho(x) \phi'(x).$$

što je fluks verovatnoće.

2.25 Verovatnoća da se jednodimenziona čestica u trenutku t nađe unutar intervala (a, b) je:

$$P_{(a,b)}(t) = \int_a^b dx \Psi^*(x, t) \Psi(x, t).$$

Brzina promene ove veličine je

$$\frac{dP_{(a,b)}(t)}{dt} = \int_a^b dx \left(\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} \Psi(x, t) + \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \right).$$

Iz vremenski zavisne Schrödinger-ove jednačine i njoj konjugovanog izraza imamo

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

pa je

$$\begin{aligned} \frac{dP_{(a,b)}(t)}{dt} &= \int_a^b dx \left(-\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} \Psi(x, t) - \frac{i}{\hbar} \Psi^*(x, t) U(x) \Psi(x, t) \right. \\ &\quad \left. + \frac{i\hbar}{2m} \Psi^*(x, t) \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} \Psi^*(x, t) U(x) \Psi(x, t) \right) \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \int_a^b dx \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} \Psi(x, t) + \frac{i\hbar}{2m} \int_a^b dx \Psi^*(x, t) \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \int_a^b dx \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \Psi(x, t) \right) - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right) \\ &\quad + \frac{i\hbar}{2m} \int_a^b dx \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right) - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \Psi(x, t) \right) \Big|_{x=a}^{x=b} \\ &= -\frac{\hbar}{m} \frac{1}{2i} \left(\Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \Psi(x, t) \right) \Big|_{x=a}^{x=b} \\ &= j(a, t) - j(b, t), \end{aligned}$$

jer je

$$j(b, t) = \frac{\hbar}{m} \frac{1}{2i} \left(\Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \Psi(x, t) \right) \Big|_{x=b} = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left(\Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right).$$

Ovde je iskorišćeno

$$\operatorname{Im} z = \frac{1}{2i} (z - z^*).$$

Ovu jednakost možemo da pokažemo direktnije polazeći od jednačine kontinuiteta, koja u jednodimenzionom slučaju glasi

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0$$

Pošto je

$$P_{(a,b)}(t) = \int_a^b dx \rho(x, t),$$

onda je

$$\frac{dP_{(a,b)}(t)}{dt} = \int_a^b dx \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = - \int_a^b dx \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = -j(x, t) \Big|_a^b = j(a, t) - j(b, t).$$

Ova jednakost kaže da do promene verovatnoće nalaženja čestice u konačnom intervalu (a, b) dolazi ako postoji fluks verovatnoće na krajevima intervala.

2.26 Pošto je

$$\Psi(x, t) = \int_0^{\infty} dk c(k) e^{ik(x-v_g t)},$$

onda imamo da je

$$\Psi(x, t=0) = \int_0^{\infty} dk c(k) e^{ikx}.$$

Ako u poslednjoj jednakosti uradimo smenu $x \rightarrow x - v_g t$ dobijamo

$$\Psi(x - v_g t, t=0) = \int_0^{\infty} dk c(k) e^{ik(x-v_g t)} = \Psi(x, t),$$

čime smo dokazali tvrđenje zadatka.

2.27 O relativističkoj čestici je bilo govora u zadatku **1.25**. U tom zadatku smo našli talasnu jednačinu koja ima relativističku disperzionu relaciju između energije i impulsa

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4.$$

Po de Broglie-ovoj hipotezi je $E = \hbar \omega$ i $p = \hbar k$. Fazna i grupna brzina talasnog paketa su

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p}, \quad v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{2pc^2}{2\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}} = \frac{pc^2}{E},$$

pa je očigledno

$$v_f v_g = \frac{E}{p} \frac{pc^2}{E} = c^2$$

2.28 Da bismo proverili linearnu nezavisnost funkcija, potrebno je da odredimo odgovarajući vronskijan. U prvom slučaju je

$$W(e^{ikx}, e^{-ikx}) = \begin{vmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \\ ike^{ikx} & -ike^{-ikx} \end{vmatrix} = -2ik,$$

što je za $k \neq 0$ različito od nule. Tada su funkcije linearno nezavisne. Ako razmatramo skup od tri funkcije $\{e^{ikx}, e^{-ikx}, \sin(kx)\}$ odgovarajući vronskijan je:

$$W(e^{ikx}, e^{-ikx}, \sin(kx)) = \begin{vmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} & \sin(kx) \\ ike^{ikx} & -ike^{-ikx} & k \cos(kx) \\ -k^2 e^{ikx} & -k^2 e^{-ikx} & -k^2 \sin(kx) \end{vmatrix} = 0$$

jer su prva i treća vrsta srazmerne. Ove tri funkcije čine linearno zavisni skup, a to je očekivan rezultat jer znamo da je $\sin(kx) = (e^{ikx} - e^{-ikx})/(2i)$.

2.29 Talasna funkcija čestice je

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{a}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}}} \exp\left(-\frac{a^2 k_0^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{(x - i a^2 k_0)^2}{2a^2 \left(1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}\right)}\right).$$

Disperzije koordinate Δx i impulsa Δp su

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}, \quad \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2},$$

gde se očekivane vrednosti računaju u stanju $\Psi(x, t)$. Najpre ćemo da nađemo gustinu verovatnoće:

$$\begin{aligned} \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{\pi} a} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}}} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{i\hbar t}{ma^2}}} e^{-a^2 k_0^2} \exp\left(-\frac{(x - i a^2 k_0)^2}{2a^2 \left(1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}\right)} - \frac{(x + i a^2 k_0)^2}{2a^2 \left(1 - \frac{i\hbar t}{ma^2}\right)}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi} a} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2}} \exp\left(-\frac{\left(x - \frac{k_0 \hbar}{m} t\right)^2}{a^2 \left(1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2\right)}\right). \end{aligned}$$

Očekivana vrednost koordinate je

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi} a} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2}} \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-\frac{\left(x - \frac{k_0 \hbar}{m} t\right)^2}{a^2 \left(1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2\right)}\right) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{k_0 \hbar}{m} t + ay \sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2}\right) e^{-y^2} dy \\ &= \frac{k_0 \hbar}{m} t, \end{aligned}$$

jer je drugi integral 0 (podintegralna funkcija je antisimetrična). Na sličan način računamo i $\langle x^2 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) x^2 \Psi(x, t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi} a} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{\left(x - \frac{k_0 \hbar}{m} t\right)^2}{a^2 \left(1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2\right)}\right) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{k_0 \hbar}{m} t + ay \sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2}\right)^2 e^{-y^2} dy \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left(\frac{k_0 \hbar}{m}\right)^2 t^2 + a^2 y^2 \left(1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2\right) + 2 \frac{k_0 \hbar}{m} t ay \sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2}\right) e^{-y^2} dy \\ &= \left(\frac{k_0 \hbar}{m}\right)^2 t^2 + \frac{1}{2} a^2 \left(1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2\right). \end{aligned}$$

U integralima koji se ovde pojavljuju najpre se uvede smena

$$y = \frac{x - \frac{\hbar k_0}{m} t}{a\sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2}} \Rightarrow dy = \frac{dx}{a\sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2}}.$$

Potom se pojavljuju integrali koji se svode na gama-funkcije. Pogledajmo najpre jedan poznat integral, koji smo računali u zadatku 2.5.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = 2 \int_0^{\infty} e^{-y^2} dy = \int_0^{\infty} t^{-1/2} e^{-t} dt = \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}.$$

Ovde smo najpre iskoristili činjenicu da je poditegralna funkcija parna, pa smo potom uveli smenu $t = y^2$. Na sličan način određujemo i vrednost integrala

$$\int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy = 2 \int_0^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy = \int_0^{\infty} t^{1/2} e^{-t} dt = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

Sad je lako odrediti disperziju položaja

$$\Delta x = \sqrt{\left(\frac{\hbar k_0}{m}\right)^2 t^2 + \frac{1}{2} a^2 \left(1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2\right) - \left(\frac{\hbar k_0}{m}\right)^2 t^2} = \frac{a}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2}$$

Očekivane vrednosti impulsa $\langle p \rangle$ i kvadrata impulsa $\langle p^2 \rangle$ su

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right), \quad \langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \right).$$

Odredimo najpre

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} &= -i\hbar \frac{1}{\sqrt{\pi} \sqrt{a}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}}} \exp\left(-\frac{a^2 k_0^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{(x - i a^2 k_0)^2}{2a^2 \left(1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}\right)}\right) \frac{-x + i a^2 k_0}{a^2 \left(1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}\right)} \\ &= \frac{i\hbar x + a^2 \hbar k_0}{a^2 \left(1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}\right)} \Psi(x, t), \end{aligned}$$

pa imamo

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi} a} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i\hbar x + a^2 \hbar k_0}{a^2 \left(1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}\right)} \exp\left(-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{a^2 \left(1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2\right)}\right) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i\hbar \left(ay \sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2} + \frac{\hbar k_0}{m} t\right) + a^2 \hbar k_0}{a^2 \left(1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}\right)} e^{-y^2} dy \\ &= \frac{i \frac{\hbar k_0}{m} t + a^2 \hbar k_0}{a^2 \left(1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}\right)} = \frac{a^2 \hbar k_0 \left(1 + i \frac{\hbar}{ma^2} t\right)}{a^2 \left(1 + i \frac{\hbar}{ma^2} t\right)} \\ &= \hbar k_0. \end{aligned}$$

Ostalo je još da odredimo $\langle p^2 \rangle$. Primitimo da je

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \left(\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \right)$$

$$= -\hbar^2 \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x}$$

Potražimo

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} &= \frac{1}{\sqrt{\pi} a} \frac{e^{-a^2 k_0^2} \exp\left(-\frac{(x-ia^2 k_0)^2}{2a^2\left(1+\frac{\hbar t}{ma^2}\right)} - \frac{(x+ia^2 k_0)^2}{2a^2\left(1-\frac{\hbar t}{ma^2}\right)}\right)}{\sqrt{1+\frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}} \frac{x-ia^2 k_0}{a^2\left(1+\frac{\hbar t}{ma^2}\right)} \frac{x+ia^2 k_0}{a^2\left(1-\frac{\hbar t}{ma^2}\right)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi} a} \frac{\exp\left(-\frac{\left(x-\frac{k_0 \hbar}{m} t\right)^2}{a^2\left(1+\frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2\right)}\right)}{\sqrt{1+\frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}} \frac{x^2+a^4 k_0^2}{a^4\left(1+\frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}\right)} \end{aligned}$$

te je dalje

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi} a^5} \frac{1}{\left(1+\frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}\right)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{\left(x-\frac{k_0 \hbar}{m} t\right)^2}{a^2\left(1+\frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2\right)}\right) (x^2+a^4 k_0^2) \\ &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi} a^4} \frac{1}{1+\frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} \left(\left(ay \sqrt{1+\frac{\hbar^2}{m^2 a^4} t^2} + \frac{\hbar k_0}{m} t \right)^2 + a^4 k_0^2 \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi} a^4} \frac{1}{1+\frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} \left(\sqrt{\pi} \left(a^4 k_0^2 + \frac{\hbar^2 k_0^2 t^2}{m^2} \right) + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(a^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^2} \right) \right) \\ &= \hbar^2 \left(\frac{1}{2a^2} + k_0^2 \right), \end{aligned}$$

pa je konačno

$$\Delta p = \sqrt{\hbar^2 \left(\frac{1}{2a^2} + k_0^2 \right) - (\hbar k_0)^2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2} a}.$$

Proizvod neodređenosti koordinate i impulsa je

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}.$$

2.30 Za slobodnu česticu evolucija stanja je određena jednačinom (2.65):

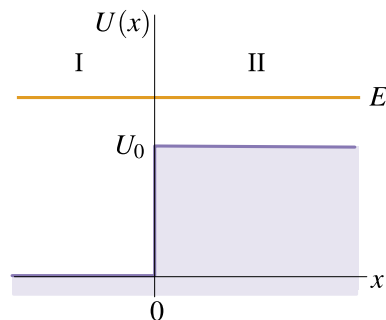
$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m} t + ikx} dk.$$

U početnom trenutku je

$$\Psi(x, t=0) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{+ikx} dk,$$

pa je funkcija $c(k)$ određena inverznom Fourier-ovom transformacijom

$$c(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t=0) e^{-ikx} dx$$



Slika 2.2: Slika uz zadatak 2.31.

Kada čestica postane slobodna (uzećemo da je to trenutak $t = 0$) njeno stanje je

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} \sqrt{2} x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right),$$

pa je

$$c(k) = \frac{1}{2\pi} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt[4]{\pi}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 - ikx\right) dx.$$

Ovo je Poisson-ov integral, koji se rešava pomoću par trikova koji su dati u dodatku druge glave. Tako je ovaj integral oblika (2.250) sa $p = m\omega/(2\hbar)$ i $q = ik$ iz čega sledi da je

$$c(k) = \frac{1}{2\pi} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt[4]{\pi}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} \frac{-ik\hbar}{m\omega} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{m\omega}} \exp\left(-\frac{\hbar k^2}{2m\omega}\right) = -i \left(\frac{m\omega\pi}{\hbar} \right)^{-3/4} k \exp\left(-\frac{\hbar k^2}{2m\omega}\right).$$

Funkcija stanja u proizvoljnom trenutku t je

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} -i \left(\frac{m\omega\pi}{\hbar} \right)^{-3/4} k \exp\left(-\frac{\hbar k^2}{2m\omega} - i\frac{\hbar k^2}{2m} t + ikx\right) dk.$$

Ovo je opet Poisson-ov integral (ovog puta se integriše po k) s tim da su sad

$$p = \frac{\hbar}{2m} \left(\frac{1}{\omega} + it \right), \quad q = -ix,$$

te je konačno, nakon malog sređivanja:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} \frac{\sqrt{2}x}{(1 + it\omega)^{3/2}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar(1 + it\omega)} x^2\right).$$

2.31 U ovom zadatku potencijalna energija

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

je prekidna u tački $x = 0$ i skok potencijalne energije je konačan. Uočavamo dve oblasti u kojima je potencijalna energija neprekidna, to su oblast I za $x < 0$ i oblast II za $x > 0$ (videti sliku 2.2). U svakoj od njih možemo da rešimo Schrödinger-ovu jednačinu a potom na granici oblasti spojimo rešenja uslovima da su neprekidna talasna funkcija i njen prvi izvod. Tako dobijamo rešenje u čitavom prostoru.

U oblasti I potencijalna energija je $U(x) = 0$ pa je Schrödinger-ova jednačina

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_1''(x) + U(x)\psi_1(x) = E\psi_1(x) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_1''(x) = E\psi_1(x) \Rightarrow \psi_1''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi_1(x)$$

Koeficijent ispred $\psi_I(x)$ na desnoj strani poslednje diferencijalne jednačine je konstantan. Pošto je $E > 0$, onda je $2mE/\hbar^2 = \text{const.} = k_1^2$, diferencijalna jednačina postaje

$$\psi_I''(x) = -k_1^2 \psi_I(x)$$

i njeno rešenje je linearna kombinacija dva nezavisna rešenja

$$\psi_I = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x}.$$

Ova dva rešenja opisuju česticu koja se kreće na desno $\psi_I^- = C_1 e^{ik_1 x}$, odnosno na levo $\psi_I^+ = C_2 e^{-ik_1 x}$. To vidimo ako napišemo ukupno rešenje vremenski zavisne Schrödinger-ove jednačine ili ako nađemo gustine verovatnoće svakog od rešenja:

$$j_{\rightarrow} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\psi_I^-(x)^* \frac{\partial \psi_I^-(x)}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(C_1^* e^{-ik_1 x} C_1 (ik_1) e^{ik_1 x} \right) = \frac{\hbar k_1 |C_1|^2}{m}, \quad j_{\leftarrow} = -\frac{\hbar k_1 |C_2|^2}{m}.$$

Dakle, prvo rešenje opisuje tok verovatnoće nadesno a drugo nalevo.

U drugoj oblasti je $U(x) = U_0$, pa je Schrödinger-ova jednačina

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_{II}''(x) + U_0 \psi_{II}(x) = E \psi_{II}(x) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_{II}''(x) = (E - U_0) \psi_{II}(x) \Rightarrow \psi_{II}''(x) = -\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \psi_{II}(x).$$

Ovde uvodimo pozitivnu konstantu $k_{II}^2 = 2m(E - U_0)/\hbar^2$. Jednačina ima isti oblik kao i u prvoj oblasti

$$\psi_{II}''(x) = -k_{II}^2 \psi_{II}(x).$$

Njeno rešenje je

$$\psi_{II} = C_3 e^{ik_{II} x} + C_4 e^{-ik_{II} x},$$

tako da i u oblasti II imamo česticu koja se kreću nadesno $C_3 e^{ik_{II} x}$ i nalevo $C_4 e^{-ik_{II} x}$, samo je njihov impuls $\hbar k_{II}$ drugačiji nego u prvoj oblasti $\hbar k_1$.

- a) Kad se čestica kreće s leva na desno, ona dolazi iz oblasti I, reflektuje se od barijere i transmituje u oblast II. To znači da u ovom slučaju u oblasti II nemamo rešenje koje opisuje tok verovatnoće nadesno. Njega ćemo izgubiti ako uzmemo da je konstanta uz odgovarajuće rešenje jednako 0. Tako je u ovom slučaju rešenje:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1 x} + A_2 e^{-ik_1 x}, & x < 0 \\ A_3 e^{ik_{II} x} + A_4 e^{-ik_{II} x}, & x > 0 \end{cases}.$$

Na granici $x = 0$ neprekidni su talasna funkcija i njen prvi izvod

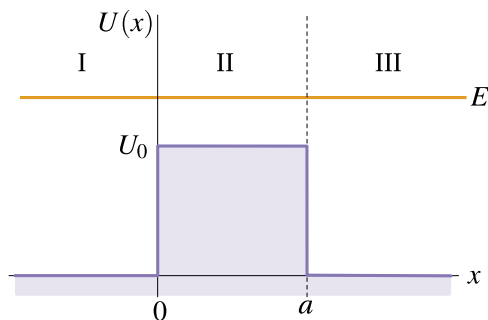
$$\left. \begin{aligned} \psi(x=0-) &= \psi(x=0+) \\ \psi'(x=0-) &= \psi'(x=0+) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} A_1 + A_2 = A_3 \\ ik_1 A_1 - ik_1 A_2 = ik_{II} A_3 \end{cases}.$$

Dobili smo sistem od dve jednačine sa tri nepoznate, što nam je sasvim dovoljno da odredimo koeficijent refleksije koji je definisan kao odnos intenziteta reflektovane i upadne struje verovatnoće

$$R = \frac{|j_r|}{|j_u|} = \frac{\frac{\hbar k_1 |A_2|^2}{m}}{\frac{\hbar k_1 |A_1|^2}{m}} = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2.$$

Iz sistem dobijamo

$$\left. \begin{aligned} A_1 + A_2 &= A_3 \\ A_1 - A_2 &= \frac{k_{II}}{k_1} A_3 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} A_1 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_{II}}{k_1} \right) A_3 \\ A_2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_{II}}{k_1} \right) A_3 \end{cases},$$



Slika 2.3: Slika uz zadatak 2.32.

pa je konačno

$$R = \frac{(k_I - k_{II})^2}{(k_I + k_{II})^2} = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}} \right)^2.$$

- b) Ako čestica naleće s desna, onda su rešenje koje opisuje upadnu i reflektovanu česticu nalazi u oblasti II. Prema tome, u ovom slučaju rešenje je

$$\psi(x) = \begin{cases} B_1 e^{ik_I x} + B_2 e^{-ik_I x}, & x < 0 \\ B_3 e^{ik_{II} x} + B_4 e^{-ik_{II} x}, & x > 0 \end{cases}.$$

Granični uslovi su

$$\left. \begin{array}{l} B_3 + B_4 = B_2 \\ B_3 - B_4 = -\frac{k_I}{k_{II}} B_2 \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{cases} B_3 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_{II}}{k_I} \right) B_2 \\ B_4 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_{II}}{k_I} \right) B_2 \end{cases}.$$

Upadna čestica je ovog puta opisana talasnom funkcijom $B_4 e^{-ik_{II} x}$, dok je reflektovana $B_3 e^{ik_{II} x}$. Koeficijent refleksije je

$$R = \frac{|j_r|}{|j_u|} = \frac{\frac{\hbar k_{II} |B_3|^2}{m}}{\frac{\hbar k_{II} |B_4|^2}{m}} = \left| \frac{B_3}{B_4} \right|^2 = \frac{(k_I - k_{II})^2}{(k_I + k_{II})^2} = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}} \right)^2.$$

Ako uporedimo dobijeni rezultat za koeficijent refleksije R sa prethodnim delom zadatka, vidimo da je on isti, što je malo neočekivano, s obzirom na klasičnu intuiciju. Dobili smo da se kvantna čestica na isti način reflektuje kada nailazi uz stepenicu (deo a) i kad ide niz nju (deo b))!

2.32 U ovom slučaju

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

imamo tri oblasti (slika 2.3): oblastima I za $x < 0$, oblast II za $x \in (0, a)$ i oblast III za $x > a$. U oblasti I i III potencijalna energija je $U(x) = 0$, pa Schrödinger-ova jednačina glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = E\psi \Rightarrow \psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi = k^2 \psi.$$

U oblasti II Schrödinger-ova jednačina je

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' - U_0 \psi = E\psi \Rightarrow \psi'' = -\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \psi = K^2 \psi.$$

Ovde smo uveli dve konstante

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad K^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}.$$

U oblastima I i III rešenje Schrödinger-ove jednačine je linearna kombinacija dva rešenja e^{ikx} i e^{-ikx} . U oblasti II rešenje je linearna kombinacija ravnih talasa e^{iKx} i e^{-iKx} . Međutim, u ovom slučaju je zgodno rešenje napisati kao linearnu kombinaciju $\sin(Kx)$ i $\cos(Kx)$. To se vidi jer je

$$\begin{aligned} \psi_{II} &= B'_1 e^{iKx} + B'_2 e^{-iKx} = B'_1 (\cos(kx) + i \sin(kx)) + B'_2 (\cos(kx) - i \sin(kx)) \\ &= (B'_1 + B'_2) \cos(Kx) + i(B'_1 - B'_2) \sin(Kx) \\ &= B_1 \cos(Kx) + B_2 \sin(Kx). \end{aligned}$$

Ovde je iskorišćena Euler-ova formula, a na kraju su uvedne nove konstante B_1 i B_2 . U oblasti II je zgodno napisati rešenje na ovaj način, jer nam u toj oblasti nisu potrebni ravni talasi, a sinus i kosinus imaju jednostavne vrednosti kad im je argument jednak nuli, što će biti slučaj na jednoj granici. Prema tome, rešenje Schrödinger-ove jednačine je

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} & x < 0 \\ B_1 \cos(Kx) + B_2 \sin(Kx), & 0 < x < a \\ C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}, & x > a \end{cases}$$

Ovde smo pretpostavili da čestica naleće s leva pa u oblasti III nemamo česticu koja se kreće nadesno. Rešenje ima dve granice, u $x = 0$ i $x = a$, pa uslovi neprekidnosti talasne funkcije i njenog prvog izvoda u tim tačkama daju četiri jednačine:

$$\begin{aligned} \psi(0-) &= \psi(0+), & \psi(a-) &= \psi(a+), \\ \psi'(0-) &= \psi'(0+), & \psi'(a-) &= \psi'(a+), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_1 + A_2 &= B_1, & B_1 \cos(Ka) + B_2 \sin(Ka) &= C_1 e^{ika}, \\ ikA_1 - ikA_2 &= KB_2, & -B_1 K \sin(Ka) + B_2 K \cos(Ka) &= C_1 i k e^{ika}, \end{aligned}$$

koje možemo napisati u matricnoj formi

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \cos(Ka) & \sin(Ka) \\ -\sin(Ka) & \cos(Ka) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ ik \end{pmatrix} C_1 e^{ika}.$$

Koeficijent transmisije je odnos transmitovane i upadne struje verovatnoće. U našem slučaju, to je

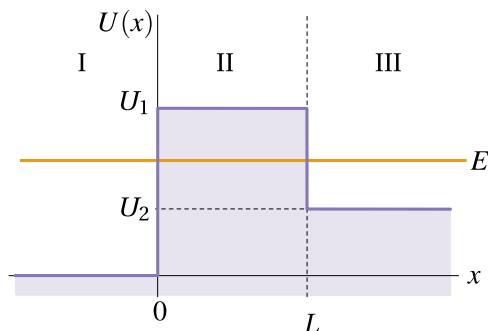
$$T = \frac{|j_t|}{|j_u|} = \frac{\frac{\hbar k |C_1|^2}{m}}{\frac{\hbar k |A_1|^2}{m}} = \left| \frac{C_1}{A_1} \right|^2.$$

Dakle, potrebno je naći odnos C_1/A_1 . Sistem napisan u matricnoj formi omogućava da se taj odnos relativno lako odredi:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(Ka) & \sin(Ka) \\ -K \sin(Ka) & K \cos(Ka) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ ik \end{pmatrix} C_1 e^{ika}.$$

Da bi se izračunao ovaj proizvod zgodno je znati kako izgleda inverzna matrica 2×2 matrice:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}.$$



Slika 2.4: Slika uz zadatak 2.33.

Nakon izvršenog matričnog množenja, dobijamo

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2kK \cos(Ka) - i(K^2 + k^2) \sin(Ka) \\ i(K^2 - K^2) \sin(Ka) \end{pmatrix} \frac{1}{2kK} C_1 e^{iKa},$$

iz čega se vidi da je

$$A_1 = \frac{2kK \cos(Ka) - i(K^2 + k^2) \sin(Ka)}{2kK} C_1 e^{iKa} \Rightarrow \frac{C_1}{A_1} = \frac{2kK}{2kK \cos(Ka) - i(K^2 + k^2) \sin(Ka)} e^{-iKa},$$

pa konačno dobijamo

$$T = \left| \frac{C_1}{A_1} \right|^2 = \frac{4k^2 K^2}{4k^2 K^2 \cos^2(Ka) + (K^2 + k^2)^2 \sin^2(Ka)}.$$

Pošto je u formulaciji zadatka data energija čestice, prisetimo se kako k i K zavise od E i konačno dobijamo

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{\cos^2(Ka) + \frac{(K^2 + k^2)^2}{4k^2 K^2} \sin^2(Ka)} \\ &= \frac{1}{\cos^2\left(\frac{\sqrt{2m(E-U_0)a}}{\hbar}\right) + \frac{1}{4} \left(\sqrt{\frac{E-U_0}{E}} + \sqrt{\frac{E}{E-U_0}} \right)^2 \sin^2\left(\frac{\sqrt{2m(E-U_0)a}}{\hbar}\right)}. \end{aligned}$$

Još treba da pronađemo energije na kojima je barijera transparentna $T = 1$. Taj uslov daje

$$T = 1 \Rightarrow 4k^2 K^2 = 4k^2 K^2 \cos^2(Ka) + (K^2 + k^2)^2 \sin^2(Ka) \Rightarrow (K^2 - k^2)^2 \sin^2(Ka) = 0.$$

Pošto je $K \neq k$ jedino rešenje ove jednačine je

$$\sin(Ka) = 0 \Rightarrow Ka = n\pi \Rightarrow E = U_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2.$$

gde je $n = 1, 2, 3, \dots$

2.33 I ovaj put imamo tri oblasti u kojima je potencijal konstantan

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_1, & 0 < x < L \\ U_2, & x > L \end{cases}$$

U oblasti I, za $x < 0$ je $U(x) = 0$, Schrödinger-ova jednačina je

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_1'' = E\psi_1 \Rightarrow \psi_1'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi_1 = k_1^2 \psi_1,$$

gde je $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Rešenje ove diferencijalne jednačine je linearna kombinacija ravnih talasa e^{ik_1x} i e^{-ik_1x} .

U oblasti II ($0 < x < L$) potencijalna energija je $U(x) = U_1$ i znamo da je $U_1 > E$. Tu je Schrödinger-ova jednačina

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_{II} + U_1\psi_{II} = E\psi_{II} \Rightarrow \psi''_{II} = \frac{2m(U_1 - E)}{\hbar^2}\psi_{II} = \kappa^2\psi_{II}.$$

Ovde smo uveli oznaku $\kappa = \sqrt{2m(U_1 - E)/\hbar^2}$. Rešenje ove jednačine je linearna kombinacija eksponencijalne rastuće $e^{\kappa x}$ i opadajuće $e^{-\kappa x}$ funkcije ili kosinusa $\text{ch}(\kappa x)$ i sinusa $\text{sh}(\kappa x)$ hiperboličnog. Pošto će sistem jednačina rešavati *Mathematica*TM odabraćemo prvu mogućnost.

I u poslednjoj oblasti III ($x > L$) potencijalna energija je $U(x) = U_2$ pa je

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_{III} + U_2\psi_{III} = E\psi_{III} \Rightarrow \psi''_{III} = -\frac{2m(E - U_2)}{\hbar^2}\psi_{III} = -k_2^2\psi_{III}.$$

Uveli smo oznaku $k_2 = \sqrt{2m(E - U_2)/\hbar^2}$ i vidimo da su rešenja e^{ik_2x} i e^{-ik_2x} . Prema tome, talasna funkcija je

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1x} + A_2 e^{-ik_1x}, & x < 0 \\ B_1 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x}, & 0 < x < L. \\ C_1 e^{ik_2x} + C_2 e^{-ik_2x}, & x > L \end{cases}$$

jer čestica naleće s leva. Sad treba da ispišemo granične uslove u $x = 0$ i $x = L$ da bismo odredili

$$R = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2.$$

Granični uslovi će dati četiri jednačine i to nije dovoljno da se odredi pet konstanti koje se pojavljuju. Međutim, nama i ne treba svih pet konstanti, interesuje nas samo odnos $A_2/A_1 = r$. Ako napišemo granične uslove, a onda svaku od jednačina podelimo sa A_1 , dobijamo

$$\begin{aligned} 1 + r &= b_1 + b_2, & b_1 e^{\kappa L} + b_2 e^{-\kappa L} &= c_1 e^{ik_2 L}, \\ ik_1 - ik_1 r &= \kappa b_1 - \kappa b_2, & b_1 \kappa e^{\kappa L} - b_2 \kappa e^{-\kappa L} &= c_1 ik_2 e^{ik_2 L}, \end{aligned}$$

Ovde su pored oznake r uvedene i oznake $b_1 = B_1/A_1$, $b_2 = B_2/A_1$ i $c_1 = C_1/A_1$. Sad imamo sistem od četiri jednačine sa četiri nepoznate i sve je spremno da nastupi *Mathematica*TM sa svojom komandom *Solve*:

Resenja =

```
Solve[1 + r == b1 + b2 &&
  I k1 - I k1 r == \[Kappa] b1 - \[Kappa] b2 &&
  b1 Exp[\[Kappa] L] + b2 Exp[-\[Kappa] L] == c1 Exp[I k2 L] &&
  b1 \[Kappa] Exp[\[Kappa] L] - b2 \[Kappa] Exp[-\[Kappa] L] ==
  c1 I k2 Exp[I k2 L], {r, b1, b2, c1}]
```

Rezultat koji da *Mathematica*TM možemo dalje iskoristiti

```
A2krozA1 = r /. Resenja[[1]]
```

a potom

```
FullSimplify[A2krozA1]
```

čim dobijamo

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{(k_1 - k_2)\kappa \operatorname{ch}(\kappa L) - i(k_1 k_2 + \kappa^2) \operatorname{sh}(\kappa L)}{(k_1 + k_2)\kappa \operatorname{ch}(\kappa L) + i(-k_1 k_2 + \kappa^2) \operatorname{sh}(\kappa L)}.$$

Sad se lako dobija da je koeficijent refleksije

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2 \kappa^2 \operatorname{ch}^2(\kappa L) + (k_1 k_2 + \kappa^2)^2 \operatorname{sh}^2(\kappa L)}{(k_1 + k_2)^2 \kappa^2 \operatorname{ch}^2(\kappa L) + (-k_1 k_2 + \kappa^2)^2 \operatorname{sh}^2(\kappa L)}.$$

2.34 U oblasti gde je potencijalna energija beskonačna, talasna funkcija je jednaka nuli. Zbog neprekidnosti talasne funkcije u tačkama $x = 0$ i $x = a$ talasna funkcija je takođe nula. U oblasti $x \in (0, a)$ potencijalna energija je $U(x) = 0$ pa je Schrödinger-ova jednačina

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

Uzmimo najpre da je $E < 0$. Onda je $E = -|E|$ pa je

$$\psi''(x) = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \psi(x) = \kappa^2 \psi(x).$$

Rešenje ove jednačine je

$$\psi(x) = A_1 e^{\kappa x} + A_2 e^{-\kappa x}.$$

Granični uslovi $\psi(0+) = 0$ i $\psi(a-) = 0$ daju

$$A_1 + A_2 = 0, \quad A_1 e^{\kappa a} + A_2 e^{-\kappa a} = 0,$$

što je ekvivalentno s jednom jednačinom

$$A_1 \operatorname{sh}(\kappa a) = 0.$$

Funkcija sinus hiperbolični ima jednu nulu, kada je argument funkcije nula, a pošto je $\kappa a \neq 0$, onda gornja jednačina ima samo jedno rešenje, a to je $A_1 = 0$. Onda je i $A_2 = 0$, pa u ovom slučaju Schrödinger-ova jednačina ima samo trivijalno rešenje $\psi(x) = 0$.

Slično je i u drugom slučaju $E = 0$. Tada je Schrödinger-ova jednačina

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

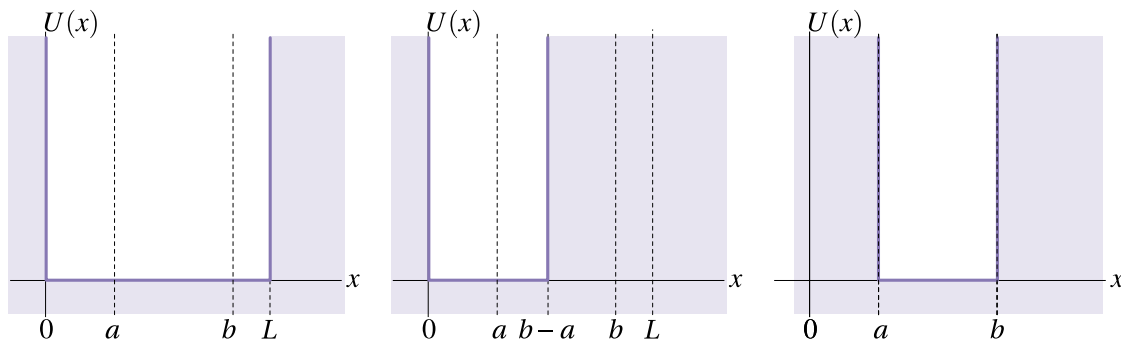
a njeno rešenje je

$$\psi = B_1 x + B_2.$$

Granični uslovi određuju integracione konstante

$$\psi(0+) = B_2 = 0, \quad \psi(a-) = B_1 a + B_2 = 0.$$

Ovaj sistem ima samo jedno rešenje $B_1 = B_2 = 0$, tako da i u ovom slučaju Schrödinger-ova jednačina nema netrivialna rešenja. Inače, ovo je primer opšteg rezultata koji kaže da je uvek $E \geq U_{\min}$, a ovde to nije zadovoljeno. Ovde smo videli koliko su granični uslovi važni za rešavanje Schrödinger-ove jednačine. Diferencijalna jednačina ima rešenja, ali granični uslovi određuju užu familiju funkcija koja određuje spektar. U ovom slučaju, ispostavilo se da među rešenjima diferencijalne jednačine ne postoje ona koja zadovoljavaju granične uslove.



Slika 2.5: Slika uz zadatak 2.35. Barijera se najpre skalira tako da se njena širina promeni sa L na $b - a$ i potom se translira za vrednost a .

2.35 Kada se čestica mase m nalazi slobodna između beskonačnih zidova u $x = 0$ i $x = L$ njen spektar je diskretan

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2, \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

i stanja su

$$\psi_n(x) = \begin{cases} 0, & x \notin (0, L) \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & x \in (0, L) \end{cases}$$

Želimo da odredimo spektar i svojstvene funkcije za potencijal u kome se zidovi nalaze u $x = a$ i $x = b$. Najpre ćemo promeniti širinu barijere sa L na $b - a$ što predstavlja skaliranje a potom se izvrši translacija za a , tako da se zidovi iz $x = 0$ i $x = b - a$ pomere u $x = a$ i $x = b$. Pri tome se talasne funkcije promene u

$$\psi_n(x) = \begin{cases} 0, & x \notin (a, b) \\ \sqrt{\frac{2}{b-a}} \sin\left(\frac{n\pi(x-a)}{b-a}\right), & x \in (a, b) \end{cases}$$

dok je spektar dozvoljenih energija

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{b-a} \right)^2,$$

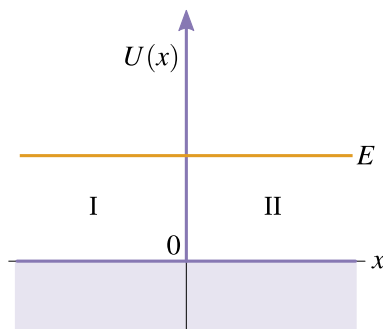
Ako je $a = -b$ potencijalna energija je simetrična, pa očekujemo da dobijemo simetrične i antisimetrične talasne funkcije. Nenulti deo talasnih funkcija u tom slučaju je

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{2b}} \sin\left(\frac{n\pi(x+b)}{2b}\right) = \frac{1}{\sqrt{b}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2b} + \frac{n\pi}{2}\right).$$

Vidimo da je osnovno stanje ($n = 1$) parna funkcija $\psi_1 = \cos(\pi x/(2b))/\sqrt{b}$, prvo pobuđeno stanje je neparna funkcija $\psi_2 = \sin(\pi x/b)/\sqrt{b}$, sledeće stanje je parno... što je u skladu sa teoremom o rešenjima Schrödinger-ove jednačine za simetričnu potencijalnu energiju.

2.36 Potencijalna energija $U(x) = aU_0\delta(x)$ ima jednu prekidnu tačku $x = 0$ (slika 2.6) pa ovde imamo dve oblasti (I oblast u kojoj je $x < 0$ i II oblast za $x > 0$) i u obe je $U = 0$ (jer je argument delta funkcije različit od nule) pa je

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi \Rightarrow \psi'' = -k^2\psi,$$



Slika 2.6: Slika uz zadatak 2.36.

gde je $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Rešenje u svakoj oblasti je linearna kombinacija ravnih talasa

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

Ovde smo prepostavili da čestica nailazi s leva, mada bi se isti rezultat dobio kad bi se uzelo da nailazi s desna, jer je barijera simetrična. Na granici dve oblasti potencijalna energija ima skok koji je beskonačan i tu moramo pažljivo da vidimo šta se dešava sa prvim izvodom talasne funkcije. Zato ćemo Schrödinger-ovu jednačinu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + aU_0\delta(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

integraliti u simetričnom intervalu oko tačke prekida potencijalne energije, u ovom slučaju od $-\varepsilon$ do ε :

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)dx + \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} aU_0\delta(x)\psi(x)dx = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E\psi(x)dx.$$

Integrale na levoj strani jednakosti lako računamo, a integral na desnoj strani možemo da procenimo na osnovu teoreme o srednjoj vrednosti integralnog računa:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'(x)\Big|_{-\varepsilon}^{\varepsilon} + aU_0\psi(0) = 2E\varepsilon\psi(\tilde{x}),$$

gde je $\tilde{x} \in (-\varepsilon, \varepsilon)$. Ako uzmemo graničnu vrednost prethodne jednačine $\varepsilon \rightarrow 0$ dobićemo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'(0+) - \psi'(0-)) + aU_0\psi(0) = 0 \Rightarrow \psi'(0+) - \psi'(0-) = \frac{2maU_0}{\hbar^2}\psi(0).$$

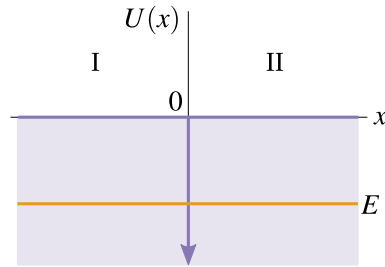
Zajedno sa uslovom neprekidnosti talasne funkcije ova jednačina upotpunjava granične uslove, na osnovu kojih određujemo koeficijente refleksije $R = |B/A|^2$ i transmisije $T = |C/A|^2$.

$$A + B = C, \quad ikC - (ikA - ikB) = \frac{2maU_0}{\hbar^2}C.$$

Rešavanjem gornjeg sistema dobijamo tražene odnose i na kraju je:

$$R = \left| \frac{-i \frac{maU_0}{k\hbar^2}}{1 + i \frac{maU_0}{k\hbar^2}} \right|^2 = \frac{\frac{m^2 a^2 U_0^2}{k^2 \hbar^4}}{1 + \frac{m^2 a^2 U_0^2}{k^2 \hbar^4}} = \frac{ma^2 U_0^2}{2E\hbar^2 + ma^2 U_0^2}.$$

$$T = \left| \frac{1}{1 + i \frac{maU_0}{k\hbar^2}} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{m^2 a^2 U_0^2}{k^2 \hbar^4}} = \frac{2E\hbar^2}{2E\hbar^2 + ma^2 U_0^2}.$$



Slika 2.7: Slika uz zadatak 2.37.

Možemo da proverimo ovaj rezultat tako što ćemo sabrati koeficijente refleksije i transmisije. Pošto je

$$R + T = 1.$$

rezultat je vrlo verovatno tačan.

2.37 Ovaj zadatak je vrlo sličan prethodnom. Razlika je u tome što koeficijent ispred delta funkcije u potencijalnoj energiji ima suprotan znak i sad treba da odredimo vezana stanja pa je $E < 0$. Dakle, u oblastima I i II (slika 2.7) Schrödinger-ova jednačina je

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = -|E|\psi \Rightarrow \psi'' = \kappa^2\psi,$$

gde je konstanta $\kappa = \sqrt{2m|E|/\hbar^2}$. Rešenje ove jednačine je

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}, & x < 0 \\ C e^{\kappa x} + D e^{-\kappa x}, & x > 0 \end{cases},$$

a konstante B i C su uzete da su jednake 0, da talasna funkcija ne bi divergirala u $-\infty$ i $+\infty$ respektivno. Uslov neprekidnosti talasne funkcije u $x = 0$ glasi glasi $A = D$ pa je talasna funkcija

$$\psi(x) = A e^{-\kappa|x|}.$$

Još jedan granični uslov je prekidnost prvog izvoda. Postupajući kao u prethodnom zadatku dobijamo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'(0+) - \psi'(0-)) - \rho\psi(0) = 0 \Rightarrow \psi'(0+) - \psi'(0-) = -\frac{2m\rho}{\hbar^2}\psi(0).$$

što daje

$$-\kappa D - \kappa A = -\frac{2m\rho}{\hbar^2}A.$$

Zajedno sa $A = D$, ovaj uslov daje

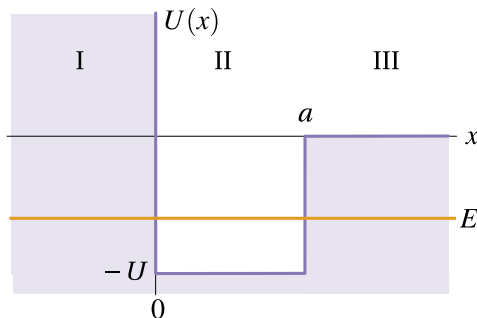
$$2\kappa A = \frac{2m\rho}{\hbar^2}A.$$

Pošto je $A \neq 0$ (jer bi inače rešenje bilo trivijalno) iz prethodne jednačine dobijamo dozvoljenu vrednost energije:

$$\kappa = \frac{m\rho}{\hbar^2} \Rightarrow \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} = \frac{m\rho}{\hbar^2} \Rightarrow E = -|E| = -\frac{m\rho^2}{2\hbar^2}.$$

Spektar je vrlo jednostavan, postoji samo jedna dozvoljena energija i jedno odgovarajuće stanje. Da bismo ga našli, treba da odredimo konstantu A a nju nalazimo iz uslova normiranja:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 e^{-2\kappa|x|} dx = 2|A|^2 \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx = 2|A|^2 \left. \frac{e^{-2\kappa x}}{-2\kappa} \right|_0^{\infty} = |A|^2 \frac{1}{\kappa} = 1.$$



Slika 2.8: Slika uz zadatak 2.38.

Ako izaberemo najjednostavniju mogućnost da je A realno, dobijamo da je talasna funkcija

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|} = \sqrt{\frac{m\rho}{\hbar^2}} e^{-\frac{m\rho}{\hbar^2}|x|}.$$

2.38 Da bismo opisali stanje ove čestice uočimo tri oblasti. U oblasti I ($x < 0$) potencijalna energija je $U = \infty$, pa je tu $\psi_I = 0$. U delu prostora od $x = 0$ do $x = a$ (oblast II) potencijalna energija je $U(x) = -U$ i tu je potencijalna energija minimalna. Zato je $E > -U$. Da bi čestica bila u vezanom stanju potrebno je da u oblasti III (za $x > a$) imamo eksponencijalno opadajuće rešenje, a za to je neophodno da bude $E < 0$. Napišimo i rešimo Schrödinger-ovu jednačinu u oblastima II i III. U oblasti II je

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_{II}(x) - U\psi_{II}(x) = E\psi_{II}(x) \Rightarrow \psi''_{II}(x) = -k^2\psi_{II}(x), \quad \text{gde je } k^2 = \frac{2m(E+U)}{\hbar^2},$$

dok je u trećoj oblasti

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_{III}(x) = -|E|\psi_{III}(x) \Rightarrow \psi''_{III}(x) = \kappa^2\psi_{III}(x), \quad \text{gde je } \kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}.$$

Stoga je talasna funkcija

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ A\cos(kx) + B\sin(kx), & 0 < x < a. \\ Ce^{-\kappa x} + D e^{\kappa x}, & x > a \end{cases}$$

Izabrali smo da je $D = 0$ da talasna funkcija ne bi divergirala u $x = \infty$. Neprekidnost talasne funkcije u $x = 0$ daje još jedan uslov $A = 0$ pa je

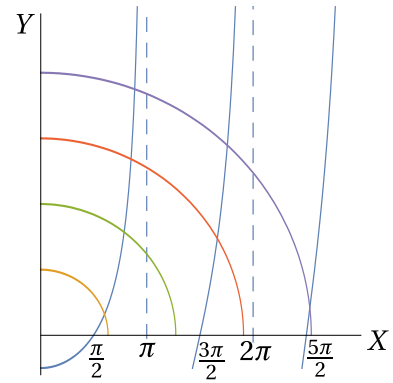
$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ B\sin(kx), & 0 < x < a. \\ Ce^{-\kappa x}, & x > a \end{cases}$$

Talasna funkcija i njen prvi izvod neprekidni su u $x = a$ što daje još dva uslova:

$$B\sin(ka) = Ce^{-\kappa a}, \quad Bk\cos(ka) = -C\kappa e^{-\kappa a}.$$

Kada ih podelimo, dobijemo jednu jednačinu

$$\kappa = -k \operatorname{ctg}(ka).$$



Slika 2.9: Grafici funkcija $Y = -X \operatorname{ctg} X$ i $X^2 + Y^2 = r^2$ za nekoliko različitih vrednosti r .

Ova jednačina povezuje k i κ (koje zavise od energije čestice E , dubine jame U i njene širine a). Da bismo videli da li postoje rešenja ove jednačine uvedimo najpre bezdimenzione veličine $X = ka$ i $Y = \kappa a$. Ako prethodnu jednačinu prepisemo preko njih, imamo

$$Y = -X \operatorname{ctg} X.$$

S druge strane, koristeći definicije veličina k i κ imamo:

$$X^2 = \frac{2ma^2(E+U)}{\hbar^2}, \quad Y^2 = \frac{2ma^2|E|}{\hbar^2} = -\frac{2ma^2E}{\hbar^2},$$

pa zaključujemo da X i Y zadovoljavaju

$$X^2 + Y^2 = \frac{2ma^2U}{\hbar^2}.$$

Ovo je jednačina kružnice poluprečnika $r = \sqrt{2ma^2U/\hbar^2}$. Primitimo još da su X i Y pozitivni (jer su k i κ pozitivne konstante), tako da se ovaj krug nalazi u prvom kvadrantu (X, Y) ravni. Sad je potrebno pronaći tačke u kojima se seku funkcija $Y = -X \operatorname{ctg} X$ i kružnica $X^2 + Y^2 = 2ma^2U/\hbar^2$. Funkcija $Y = -X \operatorname{ctg} X$ je negativna za $X < \pi/2$ i prvu nulu ima u $X = \pi/2$. Ako je $\pi/2 < X < \pi$ funkcija $Y = -X \operatorname{ctg} X$ je u prvom kvadrantu i postojaće tačka preseka te funkcije i kružnice samo ako je poluprečnik kružnice $r > \pi/2$. Tada imamo bar jedno vezano stanje. Njih će biti više ako je poluprečnik kružnice veći (šira jama ako je veće a ili dublja jama ukoliko je veće U). Dakle, da bi se pojavila vezana stanja dovoljno je da imamo jedno vezano stanje i potrebno je da bude

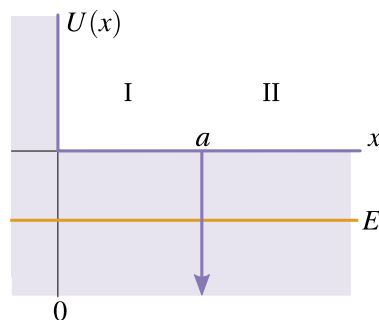
$$\sqrt{\frac{2ma^2U}{\hbar^2}} \geq \frac{\pi}{2} \Rightarrow a \geq \frac{\pi\hbar}{2\sqrt{2mU}},$$

što znači da je minimalna širina potencijalne jame za koju se pojavljuje vezano stanje

$$a_{\min} = \frac{\pi\hbar}{2\sqrt{2mU}}.$$

2.39 U oblasti gde je potencijalna energija beskonačna talasna funkcija je 0. Ostatak prostora $x > 0$ ćemo da podelimo na dve oblasti koje su odvojene tačkom u kojoj postoji skok potencijalne energije. To je u ovom slučaju $x = a$. U obe oblasti potencijalna energija je nula. Tražimo vezana stanja, pa u $+\infty$ talasna funkcija treba da je 0, a to zahteva da je $E < 0$. Dakle, rešenje Schrödinger-ove jednačine je

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ A \operatorname{sh}(\kappa x) + B \operatorname{ch}(\kappa x), & 0 < x < a \\ C \exp(-\kappa x) + D \exp(\kappa x), & x > a \end{cases}.$$



Slika 2.10: Slika uz zadatak 2.39.

Ovde je $\kappa = \sqrt{2m|E|/\hbar^2}$. Pošto je $\psi(x=0+) = 0$ imamo i da je $B = 0$, što pojednostavljuje gornji izraz

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ A \operatorname{sh}(\kappa x), & 0 < x < a \\ C \exp(-\kappa x), & x > a \end{cases}$$

Neprekidnost talasne funkcije i prekidnost talasne funkcije (zbog delta funkcije) u tački $x = a$ daju:

$$A \operatorname{sh}(\kappa a) = C \exp(-\kappa a), \quad -C\kappa \exp(-\kappa a) - A\kappa \operatorname{ch}(\kappa a) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} A \operatorname{sh}(\kappa a).$$

Iz ovih jednačina dobija se transcendentna jednačina za κ

$$\operatorname{th}(\kappa a) = \frac{\hbar^2 \kappa}{2m\alpha - \hbar^2 \kappa},$$

iz koje je moguće odrediti κ (grafički ili numerički) a onda možemo da nađemo i energiju koja je

$$E = -\frac{\kappa^2 \hbar^2}{2m},$$

čime je određeno ono što treba da se nađe u ovom zadatku. Kad odredimo κ , možemo napisati i talasnu funkciju. Zbog graničnog uslova, talasna funkcija je

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ A \operatorname{sh}(\kappa x), & 0 < x < a \\ A \operatorname{sh}(\kappa a) \exp(-\kappa(x-a)), & x > a \end{cases}$$

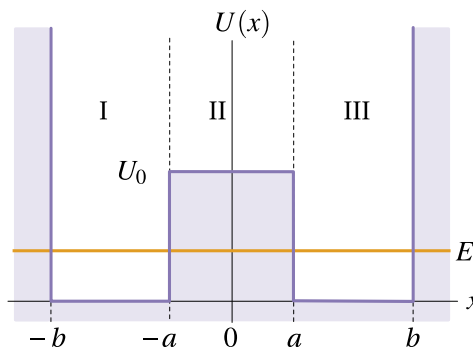
Uslov normiranja daje jednačinu za konstantu A

$$\int_0^a A^2 \operatorname{sh}^2(\kappa x) dx + \int_a^\infty A^2 \operatorname{sh}^2(\kappa a) \exp(-2\kappa(x-a)) dx = 1 \Rightarrow A = 2\sqrt{\frac{\kappa}{e^{2\kappa a} - 2\kappa a - 1}},$$

čime je određena i talasna funkcija.

2.40 Talasnu funkciju atoma azota posmatračemo u tri oblasti gde je potencijalna energija deo po deo konstantna:

$$\begin{aligned} \text{oblast I: } & (-b, -a), \quad U(x) = 0, \\ \text{oblast II: } & (-a, a), \quad U(x) = U_0, \\ \text{oblast III: } & (a, b), \quad U(x) = 0. \end{aligned}$$



Slika 2.11: Slika uz zadatak 2.40.

Pri tome, znamo još da je $\psi(-b+0) = 0$ i $\psi(b-0) = 0$ jer je levo od I i desno od III potencijalna energija beskonačna. Kad rešimo Schrödinger-ovu jednačinu u svakoj oblasti imamo:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 \sin(kx) + A_2 \cos(kx), & \text{oblast I} \\ B_1 \operatorname{sh}(\kappa x) + B_2 \operatorname{ch}(\kappa x), & \text{oblast II} \\ C_1 \sin(kx) + C_2 \cos(kx), & \text{oblast III} \end{cases} .$$

Ovde su uvedene oznake:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \kappa^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} .$$

a) Granični uslovi $\psi(-b+0) = 0$ i $\psi(b-0) = 0$ određuju dve konstante:

$$\psi(-b+0) = 0 \Rightarrow -A_1 \sin(kb) + A_2 \cos(kb) = 0 \Rightarrow A_2 = A_1 \operatorname{tg}(kb),$$

$$\psi(b-0) = 0 \Rightarrow C_1 \sin(kb) + C_2 \cos(kb) = 0 \Rightarrow C_2 = -C_1 \operatorname{tg}(kb),$$

pa se talasna funkcija može napisati

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin k(x+b), & \text{oblast I} \\ B_1 \operatorname{sh}(\kappa x) + B_2 \operatorname{ch}(\kappa x), & \text{oblast II} \\ C \sin k(x-b), & \text{oblast III} \end{cases} .$$

gde su uvedene nove konstante: $A = A_1 / \cos(kb)$ i slično $C = C_1 / \cos(kb)$. Granični uslovi neprekidnosti talasne funkcije i prvog izvoda talasne funkcije u $x = \pm a$ daju:

$$-A \sin k(a-b) = -B_1 \operatorname{sh}(\kappa a) + B_2 \operatorname{ch}(\kappa a), \quad A k \cos k(a-b) = \kappa (B_1 \operatorname{ch}(\kappa a) - B_2 \operatorname{sh}(\kappa a)),$$

$$C \sin k(a-b) = B_1 \operatorname{sh}(\kappa a) + B_2 \operatorname{ch}(\kappa a), \quad C k \cos k(a-b) = \kappa (B_1 \operatorname{ch}(\kappa a) + B_2 \operatorname{sh}(\kappa a)),$$

Saberimo i oduzmimo parove jednačina u prvoj i drugoj koloni:

$$2B_2 \operatorname{ch}(\kappa a) = (C - A) \sin k(a-b), \quad 2\kappa B_2 \operatorname{sh}(\kappa a) = k(C - A) \cos k(a-b),$$

$$2B_1 \operatorname{sh}(\kappa a) = (A + C) \sin k(a-b), \quad 2\kappa B_1 \operatorname{ch}(\kappa a) = k(A + C) \cos k(a-b).$$

Na taj način smo sistem od četiri jednačine sa četiri nepoznate razdvojili na dva sistema po dve jednačine. U prvoj vrsti je sistem po nepoznatim veličinama B_2 i $C - A$, dok je u drugoj vrsti sistem sa nepoznatim B_1 i $A + C$. Da bi jednačine iz druge vrste bile zadovoljene potrebno je da bude $B_1 = 0$ i $C = -A$. Tad se prva vrsta svodi na

$$B_2 \operatorname{ch}(\kappa a) = -A \sin k(a-b), \quad \kappa B_2 \operatorname{sh}(\kappa a) = -kA \cos k(a-b).$$

Deljenjem ovih dveju jednačina dobijamo uslov:

$$\kappa \operatorname{th}(\kappa a) = k \operatorname{ctg} k(a - b).$$

Pošto k i κ zavise od E ovo je zapravo uslov za energiju.

$$\sqrt{U_0 - E} \operatorname{th}\left(\sqrt{2m(U_0 - E)} \frac{a}{\hbar}\right) = \sqrt{E} \operatorname{ctg}\left(\sqrt{2mE} \frac{a - b}{\hbar}\right).$$

Kad energija zadovoljava ovaj uslovi, rešenje je

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin k(b + x), & \text{oblast I} \\ A \frac{\sin k(b - a)}{\operatorname{ch}(\kappa a)} \operatorname{ch}(\kappa x), & \text{oblast II} \\ A \sin k(b - x), & \text{oblast III} \end{cases}.$$

Konstantu A možemo da odredimo iz uslova normiranja. Kao što vidimo, dobijeno rešenje je simetrično. Ako, s druge strane, uzmemo da je prva vrsta zadovoljena treba da zahtevamo da je $B_2 = 0$ i $C = A$ i tada druga vrsta postaje

$$B_1 \operatorname{sh}(\kappa a) = A \sin k(a - b), \quad \kappa B_1 \operatorname{ch}(\kappa a) = k A \cos k(a - b).$$

Podelimo ove dve jednačine i dobićemo

$$\kappa \operatorname{cth}(\kappa a) = k \operatorname{ctg} k(a - b) \Rightarrow \sqrt{U_0 - E} \operatorname{cth}\left(\sqrt{2m(U_0 - E)} \frac{a}{\hbar}\right) = \sqrt{E} \operatorname{ctg}\left(\sqrt{2mE} \frac{a - b}{\hbar}\right).$$

Uz ovaj uslov za energiju ide rešenje

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin k(b + x), & \text{oblast I} \\ -A \frac{\sin k(b - a)}{\operatorname{sh}(\kappa a)} \operatorname{sh}(\kappa x), & \text{oblast II} \\ -A \sin k(b - x), & \text{oblast III} \end{cases},$$

što je antisimetrično rešenje.

b) Razmotrimo uslove za energiju kod simetričnog i antisimetričnog stanja. Neka su

$$f_s(E) = \sqrt{U_0 - E} \operatorname{th}\left(\sqrt{2m(U_0 - E)} \frac{a}{\hbar}\right), \quad f_{as}(E) = \sqrt{U_0 - E} \operatorname{cth}\left(\sqrt{2m(U_0 - E)} \frac{a}{\hbar}\right),$$

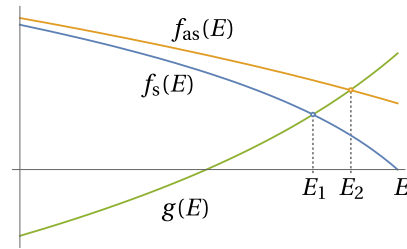
i

$$g(E) = \sqrt{E} \operatorname{ctg}\left(\sqrt{2mE} \frac{a - b}{\hbar}\right).$$

Tada je uslov za simetrična i antisimetrična stanja

$$f_s(E) = g(E), \quad f_{as}(E) = g(E).$$

Funkcije $f_s(E)$ i $f_{as}(E)$ su opadajuće, dok je $g(E)$ rastuća (slika 2.12). Pri tome još važi $g(E) < f_s(E) < f_{as}(E)$. Ako sa E_1 označimo rešenje jednačine $f_s(E_1) = g(E_1)$ a sa E_2 rešenje $f_{as}(E_2) = g(E_2)$, zbog gornje produžene jednakosti imamo da je $E_1 < E_2$. Zato je osnovno stanje simetrično a pobuđeno stanje je antisimetrično.

Slika 2.12: Funkcije $f_s(E)$, $f_{as}(E)$ i $g(E)$.

2.41 Čestica mase m nalazi se u osnovnom stanju između beskonačno visokih zidova koji su na rastojanju a tako da je njena funkcija stanja

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right), & x \in (0, a) \\ 0, & x \notin (0, a) \end{cases}.$$

Kad se zid pomeri, potencijalna energija se promeni, pa se menjaju i svojstvene funkcije i spektar. Čestica je i dalje između beskonačnih zidova ali oni su na rastojanju $2a$, tako da su svojstvene funkcije i spektar energija (videti zadatak 2.35):

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), & x \in (0, 2a) \\ 0, & x \notin (0, 2a) \end{cases}, \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2.$$

Da bismo odredili evoluciju potrebno je početno stanje razviti po bazu svojstvenih stanja novog hamiltonijana:

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x).$$

Pomnožimo gornju jednačinu sa $\psi_k^*(x)$ i prointegralimo dobijeni izraz po intervalu $(0, 2a)$, koristeći ortogonalnost svojstvenih stanja, dobijamo:

$$\int_0^{2a} \psi_k^*(x) \psi(x) dx = \int_0^{2a} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_k^*(x) \psi_n(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int_0^{2a} \psi_k^*(x) \psi_n(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{nk} = c_k.$$

Prema tome, koeficijenti c_n su

$$\begin{aligned} c_n &= \int_0^a \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \\ &= \frac{\sqrt{2}}{2a} \int_0^a \left(\cos\left(\left(\frac{n}{2}-1\right)\frac{\pi x}{a}\right) - \cos\left(\left(\frac{n}{2}+1\right)\frac{\pi x}{a}\right) \right) dx \\ &= \frac{\sqrt{2}}{2a} \left(\frac{\sin\left(\frac{n}{2}-1\right)\frac{\pi x}{a}}{\left(\frac{n}{2}-1\right)\frac{\pi}{a}} - \frac{\sin\left(\frac{n}{2}+1\right)\frac{\pi x}{a}}{\left(\frac{n}{2}+1\right)\frac{\pi}{a}} \right) \Bigg|_0^a \quad (\text{za } n \neq 2) \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{2\pi} \sin \frac{n\pi}{2} \left(\frac{1}{\frac{n}{2}-1} - \frac{1}{\frac{n}{2}+1} \right) \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{4}{n^2-4} \sin \frac{n\pi}{2}. \end{aligned}$$

Za $n = 2$ je

$$c_2 = \int_0^a \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Prema tome, koeficijenti su

$$c_n = \begin{cases} -\frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{4}{(4k-3)^2-4}, & n = 4k-3 \\ \frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{4}{(4k-1)^2-4}, & n = 4k-1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}, & n = 2 \\ 0, & n = 2(k+1) \end{cases}, \quad (k \in \mathbb{N}),$$

pa je dalja evolucija opisana jednačinom:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2(x) e^{-i \frac{\hbar \pi^2}{2ma^2} t} + \frac{4\sqrt{2}}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{1}{(4k-1)^2-4} \psi_{4k-1}(x) e^{-i \frac{\hbar^2 \pi^2 (4k-1)^2}{8ma^2} t} - \frac{1}{(4k-3)^2-4} \psi_{4k-3}(x) e^{-i \frac{\hbar^2 \pi^2 (4k-3)^2}{8ma^2} t} \right).$$

2.42 U zadatku **2.13** smo rešavali Schrödinger-ovu jednačinu za dvodimenzioni sistem, kakav imamo i ovde. Videli smo da se Schrödinger-ova jednačina svodi na dve nezavisne jednačine duž x - i y -ose, da je talasna funkcija proizvod rešenja jednodimenzionih Schrödinger-ovih jednačina i da je energija zbir energija koje se dobijaju u 1D slučajevima. Ovde imamo česticu između beskonačnih zidova i znamo da je odnos širine i dužine jame je 1 : 2. Možemo da uzmemo da je potencijalna energija

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < 2a \\ \infty, & \text{van pravougaonika} \end{cases}.$$

Rešavanjem Schrödinger-ove jednačine dobija se:

$$\psi_{n_x, n_y} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sqrt{\frac{2}{2a}} \sin\left(\frac{n_y \pi y}{2a}\right), \quad E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n_x^2 \pi^2}{a^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n_y^2 \pi^2}{4a^2}.$$

Prema tome, energija stanja koje opisujemo kvantnim brojevima (n_x, n_y) je

$$E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} (4n_x^2 + n_y^2).$$

Treba da nađemo dva para (n_x, n_y) koji imaju isti zbir $4n_x^2 + n_y^2$. Osnovno stanje je $(1, 1)$ i ono je nedegenerisano. Pošto je sledeći kvantni broj $n_x = 2$, dobijamo da je $4n_x^2 + n_y^2 \geq 17$. Prva sledeća mogućnost je $4 \cdot 2^2 + 2^2 = 20$ a pošto jednačina $4 + n_y^2 = 20$ ima rešenje $n_y = 4$, nalazimo da je energija prvog degenerisanog stanja

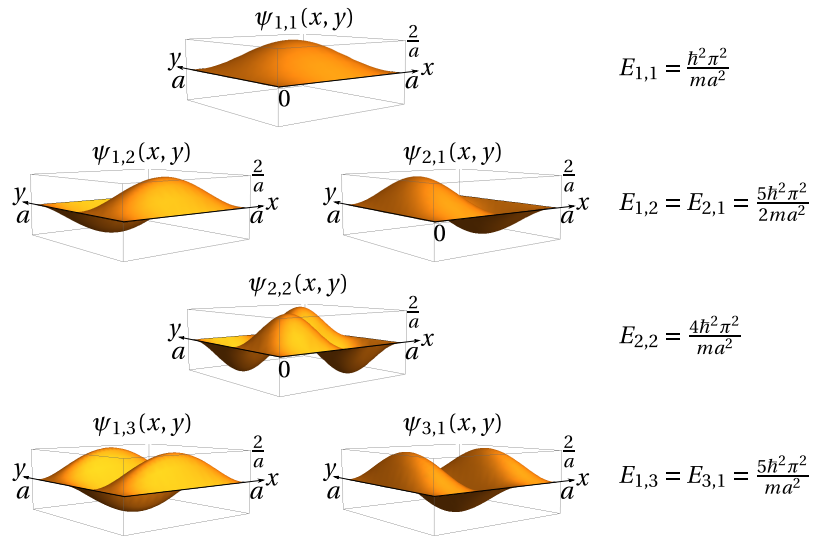
$$E_{2,2} = E_{1,4} = \frac{5\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}.$$

2.43 Ovde imamo dvodimenzioni sistem sa dva kvantna broja (n_x, n_y) čije su talasne funkcije i energije:

$$\psi_{n_x, n_y}(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right), \quad E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2),$$

pa su gustine verovatnoće

$$|\psi_{n_x, n_y}(x, y)|^2 = \frac{4}{a^2} \sin^2\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right).$$



Slika 2.13: Funkcije stanja čestice između dva beskonačna zida.

Kvantni brojevi n_x i n_y su prirodni brojevi. Osnovno stanje se dobija za $n_x = n_y = 1$, nede generisano je i ima najmanju moguću energiju $E_{1,1} = \hbar^2 \pi^2 / (ma^2)$. Talasna funkcija i gustina verovatnoće su

$$\psi_{1,1}(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right), \quad |\psi_{1,1}(x, y)|^2 = \frac{4}{a^2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right).$$

Sledeći energetski nivo je degenerisan, dobija se za $(n_x, n_y) = (1, 2) = (2, 1)$ i talasne funkcije i gustine verovatnoće su

$$\psi_{1,2}(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right), \quad |\psi_{1,2}(x, y)|^2 = \frac{4}{a^2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi y}{a}\right),$$

$$\psi_{2,1}(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right), \quad |\psi_{2,1}(x, y)|^2 = \frac{4}{a^2} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right).$$

Drugi pobudeni nivo je nede degenerisan $(n_x, n_y) = (2, 2)$ energije $E_{2,2} = 4\hbar^2 \pi^2 / (ma^2)$ sa talasnom funkcijom i gustinom verovatnoće

$$\psi_{2,2}(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right), \quad |\psi_{2,2}(x, y)|^2 = \frac{4}{a^2} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi y}{a}\right),$$

Naredni nivo je degenerisan, ima energiju $E_{1,3} = E_{3,1} = 5\hbar^2 \pi^2 / (ma^2)$ a talasne funkcije i gustine verovatnoće su:

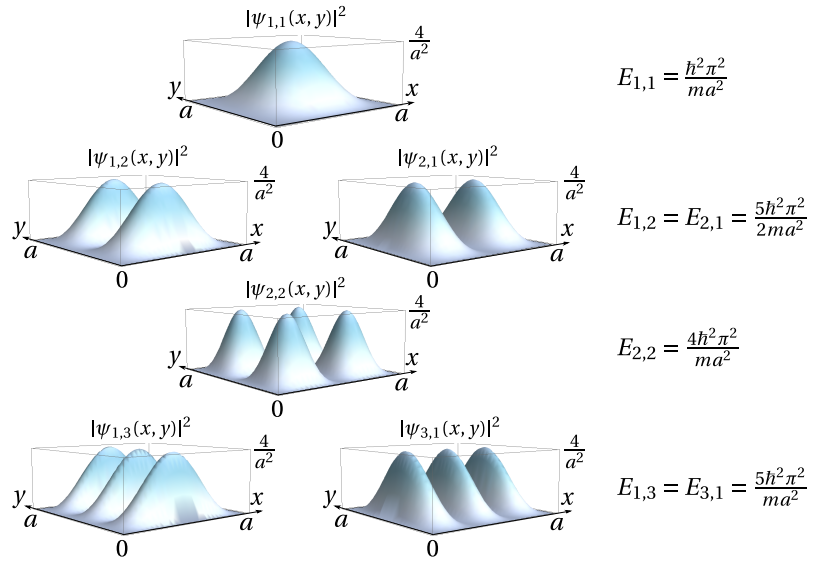
$$\psi_{1,3}(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{3\pi y}{a}\right), \quad |\psi_{1,3}(x, y)|^2 = \frac{4}{a^2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{3\pi y}{a}\right),$$

$$\psi_{3,1}(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right), \quad |\psi_{3,1}(x, y)|^2 = \frac{4}{a^2} \sin^2\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right).$$

Skice talasnih funkcija i gustina verovatnoće prikazane su na slikama 2.13 i 2.14.

2.44 Na osnovu pretpostavki zadatka važi da je

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_k''(x) + U(x)\psi_k(x) = E_k \psi_k(x), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_{k+1}''(x) + U(x)\psi_{k+1}(x) = E_{k+1} \psi_{k+1}(x).$$



Slika 2.14: Gustine verovatnoće za česticu između dva beskonačna zida.

Pomnožimo prvu jednačinu sa $\psi_{k+1}(x)$ i drugu sa $\psi_k(x)$ i oduzmimo prvu jednačinu od druge:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi''_{k+1}(x)\psi_k(x) - \psi''_k(x)\psi_{k+1}(x)) = (E_{k+1} - E_k)\psi_{k+1}(x)\psi_k(x),$$

i zatim prointegralimo dobijenu jednačinu u intervalu (a, b) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_a^b (\psi''_{k+1}(x)\psi_k(x) - \psi''_k(x)\psi_{k+1}(x)) dx = (E_{k+1} - E_k) \int_a^b \psi_{k+1}(x)\psi_k(x) dx.$$

Dodamo i oduzmemo pod integralom $\psi'_{k+1}(x)\psi'_k(x)$ pa ćemo imati

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_a^b \frac{d}{dx} (\psi'_{k+1}(x)\psi_k(x) - \psi'_k(x)\psi_{k+1}(x)) dx = (E_{k+1} - E_k) \int_a^b \psi_{k+1}(x)\psi_k(x) dx,$$

pa je

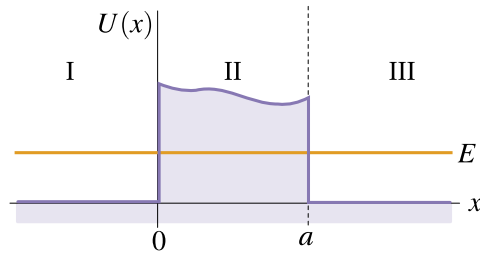
$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'_{k+1}(x)\psi_k(x) - \psi'_k(x)\psi_{k+1}(x)) \Big|_a^b = (E_{k+1} - E_k) \int_a^b \psi_{k+1}(x)\psi_k(x) dx,$$

Prvi sabirak s leve strane je 0, jer su a i b nule funkcije $\psi_k(x)$. Funkcija $\psi_k(x)$ nema drugih nula na intervalu (a, b) , pa ćemo bez smanjenja opštosti pretpostaviti da je unutar intervala (a, b) funkcija pozitivna $\psi_k(x) > 0$. To onda znači i da je $\psi'_k(a) > 0$ i $\psi'_k(b) < 0$. Pretpostavimo da funkcija $\psi_{k+1}(x)$ na intervalu $[a, b]$ nema nula, dakle ima uvek isti znak (recimo da je pozitivna). Pogledajmo znak leve i desne strane gornje jednačine:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\underbrace{\psi'_k(b)}_{<0} \underbrace{\psi_{k+1}(b)}_{>0} - \underbrace{\psi'_k(a)}_{>0} \underbrace{\psi_{k+1}(a)}_{>0} \right) = \underbrace{(E_{k+1} - E_k)}_{>0} \int_a^b \underbrace{\psi_{k+1}(x)}_{>0} \underbrace{\psi_k(x)}_{>0} dx.$$

što je kontradiktorno, jer je leva strana negativna a desna pozitivna. Ako pretpostavimo da je $\psi_{k+1}(x)$ na intervalu $[a, b]$ negativno, onda je

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\underbrace{\psi'_k(b)}_{<0} \underbrace{\psi_{k+1}(b)}_{<0} - \underbrace{\psi'_k(a)}_{>0} \underbrace{\psi_{k+1}(a)}_{<0} \right) = \underbrace{(E_{k+1} - E_k)}_{>0} \int_a^b \underbrace{\psi_{k+1}(x)}_{<0} \underbrace{\psi_k(x)}_{>0} dx.$$



Slika 2.15: Slika uz zadatak 2.45.

Sad je leva strana pozitivna, a desna negativna, što je opet kontradiktorno. Zaključujemo da postoji tačka $c \in (a, b)$ u kojoj je $\psi_{k+1}(c) = 0$.

2.45 Podelimo pravac duž kog se kreće čestica na tri oblasti (slika 2.15): oblast I je $x < 0$, u oblasti II je barijera i u oblast III je deo iza barijere $x > a$. U oblastima I i III čestica je slobodna, pa su tu rešenja ravni talasi. U oblasti II uzećemo rešenje koje se dobija WKB aproksimacijom. Stoga je talasna funkcija

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'} + \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'}, & 0 < x < a, \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}, & x > a \end{cases}$$

Ovde je $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ ako je E energija s kojom čestica naleće na barijeru. Koeficijent F smo uzeli da je 0 jer čestica naleće s leva (po uslovu zadatka). Granični uslovi daju četiri jednačine:

$$\begin{aligned} A + B &= \frac{C}{\sqrt{p(0)}} + \frac{D}{\sqrt{p(0)}}, & \frac{C}{\sqrt{p(a)}} e^{-\gamma} + \frac{D}{\sqrt{p(a)}} e^{\gamma} &= F e^{ika}, \\ ikA - ikB &= -\frac{\sqrt{p(0)}}{\hbar} C + \frac{\sqrt{p(0)}}{\hbar} D, & -\frac{C\sqrt{p(a)}}{\hbar} e^{-\gamma} + \frac{D\sqrt{p(a)}}{\hbar} e^{\gamma} &= F i k e^{ika}, \end{aligned}$$

gde je

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx.$$

Ovde smo pretpostavili da se amplituda malo menja pod barijerom. Gornje jednačine možemo napisati u matričnoj formi:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{p(0)}} & \frac{1}{\sqrt{p(0)}} \\ -\frac{\sqrt{p(0)}}{\hbar} & \frac{\sqrt{p(0)}}{\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{p(a)}} e^{-\gamma} & \frac{1}{\sqrt{p(a)}} e^{\gamma} \\ -\frac{\sqrt{p(a)}}{\hbar} e^{-\gamma} & \frac{\sqrt{p(a)}}{\hbar} e^{\gamma} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ ik \end{pmatrix} F e^{ika}.$$

Koeficijent transmisije je

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2.$$

Zato nam treba odnos F/A , a to se može dobiti iz gornje matrične jednakosti:

$$\frac{F}{A} = \frac{2i\hbar k \sqrt{p(0)} \sqrt{p(a)}}{i\hbar k \sqrt{p(0)} (\sqrt{p(0)} + \sqrt{p(a)}) \operatorname{ch} \gamma + (\hbar^2 k^2 - p(0)^{3/2} \sqrt{p(a)}) \operatorname{sh} \gamma} e^{-ika}.$$

Sad ćemo uvesti nekoliko pretpostavki koje će nam omogućiti da procenimo gornji odnos. Najpre uzimamo da je $p(a) \approx p(0)$, odnosno da se impuls (pa time i amplituda) malo menja, a to je pretpostavka WKB aproksimacije. Potom, uzimamo da je barijera jako visoka ili široka. U

oba slučaja, imali bismo da je $D \rightarrow 0$ a onda uslov na granici $x = a$ daje $p(a) = -ik\hbar$. U ovoj aproksimaciji je $e^\gamma \gg e^{-\gamma}$ (jer je barijera dugačka) pa je

$$\operatorname{ch} \gamma \approx \frac{1}{2} e^\gamma, \quad \operatorname{sh} \gamma \approx \frac{1}{2} e^\gamma.$$

Uz sve ove pretpostavke, dobijamo da je

$$\frac{F}{A} = e^{-\gamma} e^{-ika},$$

pa je konačno

$$T = e^{-2\gamma}.$$

Ovu formulu prvi je izveo Gamow i ona omogućava da se proceni koeficijent transmisije i za vrlo složene barijere.

2.46 Koeficijent transmisije u WKB aproksimaciji je

$$T = e^{-2\gamma}, \quad \gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{\alpha}^{\beta} |p(x)| dx, \quad p(x) = \sqrt{2m(U(x) - E)}$$

gde su α i β tačke u kojima se klasična čestica zaustavlja, tako da za njih važi $U(\alpha) = U(\beta) = E$. Najpre ćemo naći te tačke. Iz oblika potencijalne energija, jasno je da se one nalaze u intervalima $(0, a)$ i $(b, a + b)$. Tako su

$$U_0 \frac{\alpha}{a} = E \Rightarrow \alpha = a \frac{E}{U_0},$$

$$U_0 \frac{a + b - \beta}{a} = E \Rightarrow \beta = a + b - a \frac{E}{U_0}.$$

Sad dalje računamo

$$\gamma \hbar = \int_{a \frac{E}{U_0}}^a \sqrt{2m \left(U_0 \frac{x}{a} - E \right)} dx + \int_a^b \sqrt{2m(U_0 - E)} dx + \int_b^{a + b - a \frac{E}{U_0}} \sqrt{2m \left(U_0 \frac{a + b - x}{a} - E \right)} dx.$$

Prvi i poslednji integral su jednaki, u prvom uvedemo smenu $y = U_0 x / a - E$ a u trećem $z = U_0(a + b - x) / a - E$, oba integrala se svode na

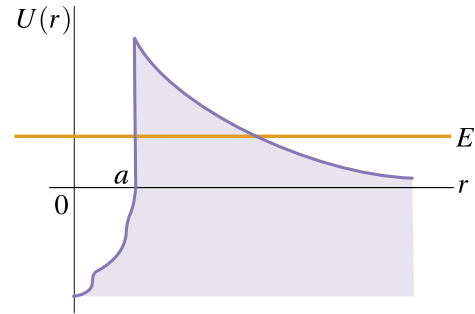
$$PI = TI = \sqrt{2m} \int_0^{U_0 - E} y^{1/2} \frac{a}{U_0} dy = \sqrt{2m} \frac{2a}{3U_0} (U_0 - E)^{3/2}.$$

Drugi integral je vrlo jednostavan, jer mu je podintegralna funkcija konstantna:

$$DI = \int_a^b \sqrt{2m(U_0 - E)} dx = \sqrt{2m(U_0 - E)}(b - a),$$

pa je konačno

$$\gamma = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \left(\frac{a}{3} - \frac{4aE}{3U_0} + b \right),$$



Slika 2.16: Slika uz zadatak 2.47.

tako da je koeficijent transmisije

$$T = \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \left(\frac{a}{3} - \frac{4aE}{3U_0} + b\right)\right).$$

Koeficijent refleksije je

$$R = 1 - T = 1 - \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \left(\frac{a}{3} - \frac{4aE}{3U_0} + b\right)\right).$$

2.47 Da bi napustila jezgro, α -čestica treba da savlada potencijalnu barijeru Coulomb-ove interakcije koja je jednaka

$$U(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2(Z-2)e^2}{r} \approx \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r},$$

jer je jezgro teško pa je Z velik broj. Neka je E energija α -čestice (videti sliku 2.16). Primenićemo WKB aproksimaciju i odrediti Gamow-ov parametar γ . Po uslovu zadatka α -čestica ulazi u barijeru na rastojanju a , a iz nje izlazi na rastojanju b , koje se može odrediti iz uslova

$$E = \frac{2Ze^2}{b} \Rightarrow b = \frac{2Ze^2}{E}.$$

Parametar γ je dalje jednak

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(r)| dr = \frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(U(r) - E)} dr.$$

Pošto je $U(r) = Eb/r$ dalje je

$$\gamma = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_a^b dr \sqrt{\frac{b}{r} - 1} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left(b \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{b}{a} - 1} - \sqrt{a(b-a)} \right).$$

Ovaj integral se nalazi tako što se izvrši smena $x = \sqrt{b/r - 1}$. Pošto je $a \ll b$, možemo da procenimo da je

$$\gamma \approx \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left(\frac{\pi}{2} b - \sqrt{ab} \right) = \frac{Z}{\sqrt{E}} \frac{\pi e^2 \sqrt{2m}}{\hbar} - \sqrt{Za} \frac{4e\sqrt{m}}{\hbar}.$$

Verovatnoća da α -čestica napusti jezgro jednaka je

$$T = e^{-2\gamma} = \exp\left(\sqrt{Za} \frac{8e\sqrt{m}}{\hbar} - \frac{Z}{\sqrt{E}} \frac{2\pi e^2 \sqrt{2m}}{\hbar}\right).$$

2.48 Komanda `DEigensystem` je relativno nova u okviru *Mathematica*TM programa. Ona omogućava da se određuju svojstvena stanja i odgovarajuće svojstvene vrednosti za diferencijalne operatore, a to je upravo ono što radimo rešavajući Schrödinger-ovu jednačinu. Sintaksa komande `DEigensystem` je

```
DEigensystem[operator, nepoznata funkcija, oblast, n]
```

i kao rezultat ćemo dobiti prvih n svojstvenih vrednosti i odgovarajuća svojstvena stanja linearnog diferencijalnog operatora `operator` u kome figuriraju nepoznata funkcija koja je definisana u domenu `oblast`. Pogledajmo kako to izgleda u konkretnim slučajevima.

- a) Harmonijski oscilator je dobro poznat sistem čiju smo Schrödinger-ovu jednačinu prvu rešili. Uz pomoć komande `DEigensystem` prvih pet svojstvenih energija i stanja dobijamo ako u *Mathematica*TM komandnoj liniji napišemo

```
DEigensystem[-(HBar^2/(2 m)) Laplacian[u[x], {x}] +
(m \[Omega]^2)/2 x^2 u[x], u[x],
{x, -\[Infinity], \[Infinity]}, 5,
Assumptions -> [HBar] > 0 && m > 0 && \[Omega] > 0]
```

što kao rezultat daje

```
{{(\[Omega] \[HBar])/2, (3 \[Omega] \[HBar])/2,
(5 \[Omega] \[HBar])/2, (7 \[Omega] \[HBar])/2,
(9 \[Omega] \[HBar])/2},
{E^(-((m x^2 \[Omega])/(2 \[HBar]))),
2 E^(-((m x^2 \[Omega])/(2 \[HBar])) x Sqrt[(m \[Omega])/\[HBar]],
E^(-((m x^2 \[Omega])/(2 \[HBar]))
(-2 + (4 m x^2 \[Omega])/\[HBar]),
E^(-((m x^2 \[Omega])/(2 \[HBar]))
(-12 x Sqrt[(m \[Omega])/\[HBar]] +
8 x^3 ((m \[Omega])/\[HBar])^(3/2)),
E^(-((m x^2 \[Omega])/(2 \[HBar]))
(12 + (16 m^2 x^4 \[Omega]^2)/\[HBar]^2
- (48 m x^2 \[Omega])/\[HBar])}}
```

a to su dobro poznati rezultati za kvantni harmonijski oscilator. Dobijene talasne funkcije nizu normirane. Ako želimo da dobijemo normirane talasne funkcije, treba da koristimo i opciju `Method->"Normalize"`.

- b) Da bismo učinili komande čitljivijim, jednu veliku komandu ćemo zameniti sa nekoliko manjih. Najpre ćemo definisati operator i granične uslove

```
Operator=-(\[HBar]^2/(2 m)) Laplacian[u[x], {x}];
GrUslovi=DirichletCondition[u[x] == 0, True];
```

Kad se izvrše ove komande, skup svojstvenih vrednosti i svojstvene funkcije dobijamo sa

```
{SvEnergije, SvFunkcije} =
DEigensystem[{Operator, GrUslovi}, u[x], {x, a, b}, 5];
```

Svojsvene energije se dobijaju kad zatražimo SvEnergije. U konkretnom slučaju *Mathematica*TM daje:

```
{(\[Pi]^2 \[HBar]^2)/(2 (-a + b)^2 m),
 (2 \[Pi]^2 \[HBar]^2)/((-a + b)^2 m),
 (9 \[Pi]^2 \[HBar]^2)/(2 (-a + b)^2 m),
 (8 \[Pi]^2 \[HBar]^2)/((-a + b)^2 m),
 (25 \[Pi]^2 \[HBar]^2)/(2 (-a + b)^2 m)}
```

dok se svojsvene funkcije dobijaju sa SvFunkcije

```
{Sin[(\[Pi] (-a + x))/(-a + b)],
 Sin[(2 \[Pi] (-a + x))/(-a + b)],
 Sin[(3 \[Pi] (-a + x))/(-a + b)],
 Sin[(4 \[Pi] (-a + x))/(-a + b)],
 Sin[(5 \[Pi] (-a + x))/(-a + b)]}
```

što su poznati rezultati.

- c) U ovom slučaju imamo dvodimenzioni sistem. Razmotrićemo bezdimenzionu jednačinu koja se dobija ako sve konstante koje se pojavljuju stavimo da su jednake 1. Operator i granični uslovi su

```
Operator=-Laplacian[u[x, y], {x, y}];;
GrUslovi=DirichletCondition[u[x, y] == 0, True];
```

Pomoću komande

```
{SvEnergije, SvFunkcije} = DEigensystem[{Operator, GrUslovi},
 u[x, y], {x, y} \[Element] Triangle[], 5];
```

dobijamo skup svojsvenih energija i svojsvenih funkcija. Svojsvene energije su

```
{5 \[Pi]^2, 10 \[Pi]^2, 13 \[Pi]^2, 17 \[Pi]^2, 20 \[Pi]^2}
```

a svojsvene funkcije su

```
{Sin[2 \[Pi] x] Sin[\[Pi] y] + Sin[\[Pi] x] Sin[2 \[Pi] y],
 Sin[3 \[Pi] x] Sin[\[Pi] y] - Sin[\[Pi] x] Sin[3 \[Pi] y],
 Sin[3 \[Pi] x] Sin[2 \[Pi] y] + Sin[2 \[Pi] x] Sin[3 \[Pi] y],
 Sin[4 \[Pi] x] Sin[\[Pi] y] + Sin[\[Pi] x] Sin[4 \[Pi] y],
 Sin[4 \[Pi] x] Sin[2 \[Pi] y] - Sin[2 \[Pi] x] Sin[4 \[Pi] y]}
```

Ovaj sistem nismo egzaktno rešili, mada ovo rešenje može da ukaže na ideju kako bi se to učinilo. Mada je `DEigensystem` korisna komanda, ona je još uvek u fazi razvoja. Trenutno, u verziji *Mathematica*TM 11.0 nije u stanju da nađe rešenja za neke analitički rešive sisteme.

INTERMECO: FORMALIZAM

3.1 Ako posmatramo realne funkcije na konačnom intervalu kao vektore prva stvar koju primjećujemo je da određeni integral

$$(f, g) = \int_a^{\beta} f(x)g(x)dx,$$

kao rezultat daje broj (skalar). Da bi ova operacija bila skarni proizvod, potrebno je da budu zadovoljeni uslovi (3.177-3.179), što ćemo sad proveriti.

a) Neka su f i g funkcije i a neki realan broj. Prva osobina skalarnog proizvoda je da važi:

$$(f, ag) = a(f, g).$$

To se lako dokazuje za gornji skalarni proizvod, na osnovu osobina integrala. Naime

$$(f, ag) = \int_a^{\beta} f(x)(ag(x))dx = a \int_a^{\beta} f(x)g(x)dx = a(f, g),$$

jer je $a = \text{const}$. Druga osobina je

$$(f, g) = (g, f)^*.$$

Krenimo od

$$(g, f)^* = \left(\int_a^{\beta} g(x)f(x)dx \right)^* = \int_a^{\beta} g(x)^* f(x)^* dx = \int_a^{\beta} g(x)f(x)dx = \int_a^{\beta} f(x)g(x)dx = (f, g).$$

Ovde smo iskoristili činjenicu da su f i g realne funkcije, pa ih kompleksno konjugovanje ne menja, kao i komutativnost podintegralnih funkcija. Treća osobina skalarnog proizvoda je zahtev

$$(f, f) \geq 0; \quad \text{ako je } (f, f) = 0, \text{ onda je } f = 0.$$

Ovde je $f = 0$ nulta funkcija koja svaku tačku intervala preslikava u 0 (odnosno $f(x) = 0$). Dakle, pogledajmo najpre šta je

$$(f, f) = \int_{\alpha}^{\beta} \underbrace{f(x)^2}_{\geq 0} dx \geq 0.$$

Ako je $(f, f) = 0$ onda je i $f(x)^2 = 0$ za svako x , pa je $f = 0$. Dakle, samo jedna funkcija ima nulti skalarni proizvod sa samom sobom, a to je nulta funkcija.

b) Schwartz-ova nejednakost glasi:

$$(f, g)^2 \leq (f, f) \cdot (g, g).$$

Preko skalarnog proizvoda koji smo ispitivali u prethodnom delu zadatka, ova nejednakost glasi

$$\left(\int_{\alpha}^{\beta} f(x)g(x) dx \right)^2 \leq \left(\int_{\alpha}^{\beta} f(x)^2 dx \right) \cdot \left(\int_{\alpha}^{\beta} g(x)^2 dx \right).$$

Schwartz-ova nejednakost se dokazuje na osnovu osobina skalarnog proizvoda. Uzmimo neki vektor $f + ag$, gde su f i g nenulti vektori i a broj koji ćemo kasnije odrediti. Na osnovu treće osobine skalarnog proizvoda imamo:

$$(f + ag, f + ag) \geq 0 \Rightarrow (f, f) + a(f, g) + a(g, f) + a^2(g, g) \geq 0.$$

Uzmimo da je $a = -(f, g)/(g, g)$. Tada poslednja jednakost postaje

$$(f, f) - 2 \frac{(f, g)^2}{(g, g)} + \frac{(f, g)^2}{(g, g)} \geq 0$$

Ako gornju nejednakost pomnožimo sa (g, g) za koji znamo da je pozitivan broj (treća osobina vektora) konačno dobijamo traženu nejednakost:

$$(f, f) \cdot (g, g) \geq (f, g)^2.$$

3.2 Neka su A i B neki operatori a ψ i χ proizvoljni vektori. Adjungovani operator od A se definiše na sledeći način: za bilo koje ψ i χ važi da je

$$(\chi, A\psi) = (A^\dagger \chi, \psi).$$

a) Na osnovu definicije treba da pokažemo da je $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$. Pođimo od

$$(\chi, AB\psi) = (\chi, A \underbrace{(B\psi)}_{\psi'}) = (\chi, A\psi') = (\underbrace{A^\dagger \chi}_{\chi'}, \psi') = (\chi', B\psi) = (B^\dagger \chi', \psi) = (B^\dagger A^\dagger \chi, \psi).$$

S druge strane, ako AB posatramo kao jedan operator, onda je

$$(\chi, AB\psi) = ((AB)^\dagger \chi, \psi).$$

Ove dve jednakosti pokazuju da za bilo koje vektore važi da je

$$(B^\dagger A^\dagger \chi, \psi) = ((AB)^\dagger \chi, \psi)$$

iz čega sledi operatorska jednakost

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

b) Za adjungovani operator od A važi

$$(\chi, A\psi) = (A^\dagger \chi, \psi) = (\psi, A^\dagger \chi)^* = (\psi, \underbrace{A^\dagger \chi}_B)^* = (B^\dagger \psi, \chi)^* = ((A^\dagger)^\dagger \psi, \chi)^* = (\chi, (A^\dagger)^\dagger \psi),$$

pa je

$$(A^\dagger)^\dagger = A.$$

Ovde smo koristili drugu osobinu skalarnog proizvoda (3.178).

3.3 Tražene osobine ćemo pokazati na osnovu dve osobine koje su dokazane u prethodnom zadatku.

a) Potražimo adjungovani operator od $A + A^\dagger$:

$$(A + A^\dagger)^\dagger = A^\dagger + (A^\dagger)^\dagger = A^\dagger + A,$$

a to je isto što i polazni operator, dakle, $A + A^\dagger$ je hermitski.

b) Adjungovanjem početnog operatora imamo

$$(AA^\dagger)^\dagger = (A^\dagger)^\dagger A^\dagger = AA^\dagger,$$

iz čega sledi da je i ovo hermitski operator.

c) Pošto je komutator $[A, A^\dagger] = AA^\dagger - A^\dagger A$, imamo

$$[A, A^\dagger]^\dagger = (AA^\dagger - A^\dagger A)^\dagger = (AA^\dagger)^\dagger - (A^\dagger A)^\dagger = AA^\dagger - A^\dagger A = -[A, A^\dagger],$$

pa je $[A, A^\dagger]$ antihermitski operator.

d) Pošto su A i B hermitski operatori, važi da je $A^\dagger = A$ i $B^\dagger = B$. Onda imamo

$$[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger = BA - AB = -(AB - BA) = -[A, B].$$

Komutator dva hermitska operatora je antihermitski operator.

3.4 Neka su $|\phi_1\rangle$ i $|\phi_2\rangle$ svojstveni vektori operatora A kojima odgovaraju različite svojstvene vrednosti a_1 i a_2 :

$$A|\phi_1\rangle = a_1|\phi_1\rangle, \quad A|\phi_2\rangle = a_2|\phi_2\rangle.$$

a) Razmotrimo sledeći izraz:

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | A\phi_1 \rangle &= \langle \phi_1 | \underbrace{A\phi_1}_{a_1|\phi_1} \rangle = a_1 \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle \\ &= \langle \phi_1 | A^\dagger |\phi_1 \rangle = \langle \phi_1 | A |\phi_1 \rangle = \langle \phi_1 | A\phi_1 \rangle^* = (a_1 \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle)^* = a_1^* \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle. \end{aligned}$$

Ovde se koristi da je $A^\dagger = A$ i osobine skalarnog proizvoda. Na osnovu produžene jednakosti imamo

$$(a_1 - a_1^*) \underbrace{\langle \phi_1 | \phi_1 \rangle}_{\neq 0} = 0 \Rightarrow a_1 = a_1^*,$$

što znači da je svojstvena vrednost $a_1 \in \mathbb{R}$. Pošto je a_1 proizvoljna svojstvena vrednost hermitskog operatora A , onda ovo tvrđenje važi za sve svojstvene vrednosti.

b) Krenimo od

$$\begin{aligned}\langle \phi_1 | A \phi_2 \rangle &= \langle \phi_1 | A \phi_2 \rangle = a_2 \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle \\ &= \langle \phi_1 A^\dagger | \phi_2 \rangle = \langle \phi_1 A | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | A \phi_1 \rangle^* = (a_1 \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle)^* = a_1^* \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle^* \\ &= a_1 \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle.\end{aligned}$$

Ovde se koristi da je A hermitski operator, definicija adjungovanog operatora, prva osobina skalarnog proizvoda i osobina dokazana u prethodnom delu ovog zadatka da je svojstvena vrednost hermitskog operatora realna. Dakle, imamo

$$(a_1 - a_2) \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0.$$

Pošto je $a_1 \neq a_2$ onda je

$$\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0,$$

što znači da su svojstvena stanja koja odgovaraju različitim svojstvenim vrednostima hermitskog operatora međusobno ortogonalna.

3.5 Očekivana veličina hermitskog operatora u stanju $|\psi\rangle$ je

$$\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | A | \psi \rangle.$$

a) Pošto je A hermitski operator, imamo

$$\langle \psi | A \psi \rangle = \langle \psi A^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi A | \psi \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle^*,$$

drugim rečima, $\langle A \rangle_{|\psi\rangle} \in \mathbb{R}$.

b) Delovanje hermitskog operatora A na stanje $|\psi\rangle$ dobija se vektor koji ima komponentu duž pravca $|\psi\rangle$ i na ortogonalni pravac, čiji ćemo ort označiti sa $|\phi\rangle$:

$$A|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle.$$

Ovde su α i β projekcije vektora $A|\psi\rangle$ na pravce $|\psi\rangle$ i $|\phi\rangle$ respektivno. Množenjem gornje jednačine sa $\langle \psi |$ dobijamo

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \alpha \underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_1 + \beta \underbrace{\langle \psi | \phi \rangle}_0 = \alpha.$$

Prema tome, prepoznamo da je $\alpha = \langle A \rangle_{|\psi\rangle}$. Sad treba još naći čemu je jednako β . Iz prve jednačine imamo

$$\beta|\phi\rangle = A|\psi\rangle - \alpha|\psi\rangle.$$

Adjungujemo ovu jednačinu i iskoristimo da je A hermitski operator

$$\beta^* \langle \phi | = \langle \psi | A - \alpha \langle \psi |,$$

pa pomnožimo poslenje dve jednačine:

$$|\beta|^2 = (\langle \psi | A - \alpha \langle \psi |) (A|\psi\rangle - \alpha|\psi\rangle) = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle - 2\alpha \langle A \rangle_{|\psi\rangle} + \alpha^2 = \langle A^2 \rangle_{|\psi\rangle} - \langle A \rangle_{|\psi\rangle}^2.$$

Dakle, dobili smo da je $\beta = (\Delta A)_{|\psi\rangle}$. Time smo pokazali da važi jednakost

$$A|\psi\rangle = \langle A \rangle_{|\psi\rangle} |\psi\rangle + (\Delta A)_{|\psi\rangle} |\phi\rangle.$$

3.6 Klasičnu veličinu xp_x treba da zamenimo operatorom koji je hermitski a kad operatore zamenimo opservablama, treba da dobijemo polaznu veličinu. U ovom zadatku ćemo operatore označavati sa kopicama $\hat{\cdot}$. Pošto \hat{x} i \hat{p}_x ne komutiraju, onda $\hat{x}\hat{p}_x$ i $\hat{p}_x\hat{x}$ nisu isti operatori. Traženi operator će biti linearna kombinacija ova dva,

$$xp_x \mapsto \alpha \hat{x}\hat{p}_x + \beta \hat{p}_x\hat{x},$$

gde su α i β realni brojevi koje ćemo odrediti. Na osnovu principa korespondencije (kad operatore zamenimo varijablama, dobijemo klasičan rezultat) znamo da je

$$\alpha + \beta = 1.$$

Operator treba da bude hermitski, pa je

$$\alpha \hat{x}\hat{p}_x + \beta \hat{p}_x\hat{x} = (\alpha \hat{x}\hat{p}_x + \beta \hat{p}_x\hat{x})^\dagger = \alpha \hat{p}_x\hat{x} + \beta \hat{x}\hat{p}_x \Rightarrow \alpha = \beta,$$

a to zajedno s prethodnom jednačinom daje

$$\alpha = \beta = \frac{1}{2}.$$

Dakle, klasičnu veličinu menjamo sa

$$xp_x \mapsto \frac{1}{2}\hat{x}\hat{p}_x + \frac{1}{2}\hat{p}_x\hat{x} = \frac{1}{2}\{\hat{x}, \hat{p}_x\},$$

gde je sa $\{ , \}$ označen antikomutator.

3.7 Svojevredne vrednosti dobijamo iz karakteristične jednačine $\det(A - \lambda I) = 0$ koja u ovom slučaju daje:

$$\begin{vmatrix} -\lambda & i & 0 \\ -i & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 3-\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow (3-\lambda)(\lambda^2-1) = 0 \Rightarrow \lambda_1 = -1, \lambda_2 = 1, \lambda_3 = 3.$$

Svojstveni vektor $|e_1\rangle$ koji odgovara svojevrednoj vrednosti $\lambda_1 = 1$ dobijamo iz

$$A|e_1\rangle = \lambda_1|e_1\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} ib_1 = -a_1 \\ -ia_1 = -b_1 \\ 3c_1 = c_1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} b_1 = ia_1 \\ c_1 = 0 \end{cases}$$

pa je vektor $|e_1\rangle$ oblika

$$|e_1\rangle = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Konstantu a_1 određujemo iz uslova

$$\langle e_1|e_1\rangle = 1 \Rightarrow a_1^2 \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \Rightarrow 2a_1^2 = 1 \Rightarrow a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

pa je konačno

$$|e_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Na isti način se nalaze i svojstveni vektori za svojstvene vrednosti $\lambda_2 = 1$ i $\lambda_3 = 3$ i oni su:

$$|e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |e_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Sad ćemo proveriti spektralnu dekompoziciju jedinice

$$\sum_{k=1}^3 |e_k\rangle\langle e_k| = I.$$

Određujemo

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^3 |e_k\rangle\langle e_k| &= |e_1\rangle\langle e_1| + |e_2\rangle\langle e_2| + |e_3\rangle\langle e_3| \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -i & 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 \\ i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Ovde smo računali tenzorski proizvod vektora vrste sa vektorom kolonom. Da se podsetimo, tenzorski proizvod dva vektora se nalazi na sledeći način:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a_1 \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} & a_2 \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} & a_3 \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_1 b_1 & a_2 b_1 & a_3 b_1 \\ a_1 b_2 & a_2 b_2 & a_3 b_2 \\ a_1 b_3 & a_2 b_3 & a_3 b_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Slično je i

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^3 \lambda_k |e_k\rangle\langle e_k| &= \lambda_1 |e_1\rangle\langle e_1| + \lambda_2 |e_2\rangle\langle e_2| + \lambda_3 |e_3\rangle\langle e_3| \\ &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -i & 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 3 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & i & 0 \\ -i & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

što je polazna matrica.

3.8 Proizvoljna 2×2 matrica može se napisati u obliku

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}.$$

a) Onda je karakteristični polinom za ovu matricu

$$p(\lambda) = \det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{vmatrix} = (a - \lambda)(d - \lambda) - bc = \lambda^2 - (a + d)\lambda + ad - bc.$$

b) Kada se u karakterističnu jednačinu na mesto argumenta uvrsti polazna matrica, dobijamo:

$$\begin{aligned} p(A) &= A^2 - (a + d)A + (ad - bc)I \\ &= \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} - (a + d) \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} + (ad - bc) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a^2 + bc & ab + bd \\ ac + cd & bc + d^2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} a^2 + ad & ab + bd \\ ac + cd & ad + d^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} ad - bc & 0 \\ 0 & ad - bc \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

što je trebalo da se dokaže.

c) Videli smo da je

$$A^2 - (a + d)A + (ad - bc)I = 0$$

U ovom izrazu prepoznamo $\text{tr}(A) = a + d$ i $\det(A) = ad - bc$, pa je

$$A^2 = A \text{tr}(A) - I \det(A).$$

3.9 Prvi vektor u bazu $\{1, x, x^2\}$ je $p_1 = 1$. Njega je potrebno samo normirati i dobićemo prvi ortonormiran vektor e_1 :

$$e_1 = \frac{p_1}{|p_1|}.$$

Pošto je

$$|p_1|^2 = (p_1, p_1) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dx = 1,$$

konačno je

$$e_1 = 1.$$

Sledeći vektor u našem skupu je $p_2 = x$. Najpre treba od tog vektora da oduzmemo njegovu projekciju na pravac prvog vektora

$$v_2 = p_2 - (p_2, e_1)e_1 = x - (x, 1)1 = x - \left(\frac{1}{2} \int_{-1}^1 x dx \right) \cdot 1 = x,$$

a potom da dobijeni vektor normiramo

$$e_2 = \frac{v_2}{|v_2|}.$$

Pošto je

$$|v_2|^2 = (v_2, v_2) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{1}{3},$$

dobijamo da je drugi ortonormirani vektor

$$e_2 = x\sqrt{3}.$$

Treći bazisni vektor je $p_3 = x^2$. Kad od njega oduzmemo projekcije na vektore e_1 i e_2 dobijamo

$$v_3 = p_3 - (p_3, e_2)e_2 - (p_3, e_1)e_1 = x^2 - \left(\frac{1}{2} \int_{-1}^1 x^3 \sqrt{3} dx \right) \sqrt{3}x - \left(\frac{1}{2} \int_{-1}^1 x^2 dx \right) 1 = x^2 - \frac{1}{3}.$$

Ovaj vektor ima normu

$$|v_3|^2 = (v_3, v_3) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \left(x^2 - \frac{1}{3} \right)^2 dx = \frac{4}{45},$$

pa dobijamo da je treći ortonormirani vektor

$$e_3 = \frac{\sqrt{5}}{2} (3x^2 - 1).$$

Tri polinoma koja smo dobili $\{1, \sqrt{3}x, \sqrt{5}(3x^2 - 1)/2\}$ poklapaju se, do na normalizaciju, sa Legendre-ovim polinomima, koji se pojavljuju kao deo rešenja svojstvenog problema operatora momenta impulsa, tako da će o njima biti reči i kasnije u ovoj knjizi.

3.10 Operator koji deluje na sledeći način $\hat{U}_a \psi(x) = \psi(x + a)$ pomera koordinatu iz x u $x + a$ pa je to operator translacije za iznos a . Najpre ćemo da odredimo adjungovani operator od \hat{U}_a . Po definiciji adjungovanog operatora je

$$\begin{aligned} (\phi, \hat{U}_a \psi) &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x)^* (\hat{U}_a \psi(x)) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x)^* \psi(x + a) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x - a)^* \psi(x) dx \\ &= (\hat{U}_a^\dagger \phi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{U}_a^\dagger \phi(x))^* \psi(x) dx. \end{aligned}$$

Ovde smo u integralu izvršili smenu promenljive $x \rightarrow x - a$. Iz

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(x - a)^* \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{U}_a^\dagger \phi(x))^* \psi(x) dx \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} (\phi(x - a) - \hat{U}_a^\dagger \phi(x))^* \psi(x) dx = 0$$

imamo da je

$$\hat{U}_a^\dagger \phi(x) = \phi(x - a).$$

Sad možmo da vidimo da je

$$\hat{U}_a^\dagger \hat{U}_a \psi(x) = \hat{U}_a^\dagger \psi(x + a) = \psi(x + a - a) = \psi(x),$$

odnosno $\hat{U}_a^\dagger \hat{U}_a = I$, što znači da je \hat{U}_a unitaran operator.

3.11 Ako je \mathcal{L} hermitski operator, onda važi da je

$$(\mathcal{L}u, v) = (u, \mathcal{L}v).$$

a) Pođimo od desne strane prethodne jednačine:

$$\begin{aligned} (u, \mathcal{L}v) &= \left(u, \frac{d}{dx} \left(p \frac{dv}{dx} \right) + qv \right) \\ &= \int_a^b u(x) \left(\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{dv(x)}{dx} \right) + q(x)v(x) \right) dx \\ &= \int_a^b u(x) \frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{dv(x)}{dx} \right) dx + \int_a^b u(x) q(x) v(x) dx \end{aligned}$$

U prvom integralu najpre ćemo da izvršimo parcijalnu integraciju

$$\int_a^b u(x) \frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{dv(x)}{dx} \right) dx = u(x) p(x) \frac{dv(x)}{dx} \Big|_a^b - \int_a^b \frac{du(x)}{dx} p(x) \frac{dv(x)}{dx} dx.$$

Prvi član je nula, jer je $u(a) = u(b) = 0$. U preostalom integralu izvršimo još jednu parcijalnu integraciju da bismo dobili:

$$\begin{aligned} \int_a^b u(x) \frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{dv(x)}{dx} \right) dx &= - \int_a^b \frac{du(x)}{dx} p(x) \frac{dv(x)}{dx} dx \\ &= - v(x) p(x) \frac{du(x)}{dx} \Big|_a^b + \int_a^b \frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{du(x)}{dx} \right) v(x) dx \\ &= \int_a^b \frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{du(x)}{dx} \right) v(x) dx. \end{aligned}$$

Prema tome, imamo

$$\begin{aligned} (u, \mathcal{L}v) &= \int_a^b \frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{du(x)}{dx} \right) v(x) dx + \int_a^b u(x) q(x) v(x) dx \\ &= \int_a^b \left(\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{du(x)}{dx} \right) + u(x) q(x) \right) v(x) dx \\ &= (\mathcal{L}u, v), \end{aligned}$$

što znači da je \mathcal{L} hermitski operator.

b) Pošto je \mathcal{L} hermitski operator, njegova svojstvena jednačina glasi

$$\mathcal{L}u = \lambda u \Rightarrow \frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{du}{dx} \right) + (\lambda - q(x)) u = 0.$$

a to je Sturm-Liouville-ova jednačina, koja je stoga svojstveni problem hermitskog operatora.

3.12 Funkcija čiji je argument matrica definisana je preko odgovarajućeg Taylor-ovog razvoja

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

U našem slučaju treba odrediti $e^{iA\alpha}$ pa ćemo iskoristiti dobro poznati Taylor-ov razvoj eksponencijalne funkcije

$$e^{iA\alpha} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(iA\alpha)^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^k}{k!} A^k.$$

Ovde smo izdvojili operacije koje se odnose na matricu. Postoji nekoliko načina da se izračuna poslednji izraz. Jedan način je da se vidi kako izgleda nekoliko prvih stepena matrice A i ako tu postoji određeno pravilo da se ono iskoristi i gornji izraz pojednostavi. Konkretno,

$$A^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I, \quad A^3 = A^2 A = I A = A, \quad A^4 = A^3 A = A^2 = I \dots$$

Ovde primećujemo da je

$$A^{2n} = I, \quad A^{2n+1} = A, \quad (n \in \mathbb{N}),$$

pa imamo

$$\begin{aligned} e^{iA\alpha} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^{2n}}{(2n)!} A^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^{2n+1}}{(2n+1)!} A^{2n+1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\alpha^{2n}}{(2n)!} I + \sum_{n=0}^{\infty} i(-1)^n \frac{\alpha^{2n+1}}{(2n+1)!} A \\ &= I \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\alpha^{2n}}{(2n)!} + iA \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\alpha^{2n+1}}{(2n+1)!} \\ &= I \cos \alpha + iA \sin \alpha. \end{aligned}$$

Pri samom kraju je iskorišćen razvoj kosinusa i sinusa funkcije realne promenljive. poslednja jednakost nam omogućava da prepoznamo tražene funkcije

$$f(\alpha) = \cos \alpha, \quad g(\alpha) = i \sin \alpha.$$

Često se ne može tako lako odrediti pravilo po kome se ponašaju stepeni od matrice. Ipak, postoji opšti recept kako se oni mogu izračunati. Za to je potrebno prisetiti se spektralnog razvoja matrice. Ako je A neka matrica i ako su $|i\rangle$ svojstveni vektori ($i = 1, 2, \dots, n$) kojima odgovaraju svojstvene vrednosti λ_i onda je

$$A = \sum_i^n \lambda_i |i\rangle \langle i|.$$

Kvadrat od A je

$$A^2 = \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i |i\rangle \langle i| \right) \left(\sum_{j=1}^n \lambda_j |j\rangle \langle j| \right) = \sum_{i,j=1}^n \lambda_i \lambda_j |i\rangle \underbrace{\langle i|j\rangle}_{\delta_{ij}} \langle j| = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 |i\rangle \langle i|.$$

Ovde je iskorišćena osobina svojstvenih vektora da oni čine ortonormirani bazis $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$. Na isti način se pokazuje da je k -ti stepen matrice A

$$A^k = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k |i\rangle \langle i|.$$

Sad je moguće odrediti proizvoljnu funkciju matrice A . U Taylor-ov razvoj sad možemo da pišemo

$$f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \sum_{i=1}^n \lambda_i^k |i\rangle \langle i| = \sum_{i=1}^n \underbrace{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \lambda_i^k}_{f(\lambda_i)} |i\rangle \langle i|,$$

tako da dobijamo slikovitu formulu

$$f\left(\sum_i^n \lambda_i |i\rangle\langle i|\right) = \sum_{i=1}^n f(\lambda_i) |i\rangle\langle i|.$$

Ovo je poznata Sylvester-ova formula. Da bismo je koristili, potrebno je rešiti svojstveni problem matrice. Pogledajmo kako to izgleda na primeru koji smo već uradili. Karakteristična jednačina matrice A je

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = -1, \lambda_2 = 1.$$

Odgovarajući svojstveni vektori su

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

pa je polazna matrica

$$A = \lambda_1 |1\rangle\langle 1| + \lambda_2 |2\rangle\langle 2| = (-1) \cdot \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix} + (1) \cdot \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Sad je

$$e^{iA\alpha} = e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix} + e^{i\alpha} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & i \sin \alpha \\ i \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix},$$

čime je ponovo dobijen isti rezultat.

3.13 Treba da nađemo \sqrt{M} , $\ln(M)$ i $\sin(M)$ gde je

$$M = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 3 \\ 0 & -3 & 0 \\ 3 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Pošto imamo tri različite funkcije, izvršićemo spektralno razlaganje matrice M i primenićemo Sylvester-ovu formulu iz prethodnog zadatka

$$f\left(\sum_i^n \lambda_i |i\rangle\langle i|\right) = \sum_{i=1}^n f(\lambda_i) |i\rangle\langle i|.$$

Rešavanjem svojstvenog problema matrice M dobijamo da su njene svojstvene vrednosti $\lambda_1 = -3$, $\lambda_2 = -1$, $\lambda_3 = 5$, sa svojstvenim vektorima

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad |3\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Dakle, matrice M se razlaže na sledeći način:

$$M = (-3) \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + (-1) \cdot \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & -1/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} + 5 \cdot \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Pre nego što nastavimo, zgodno je proveriti gornju jednačinu. To možemo lako da uradimo tako što ćemo videti da li je desna strana zaista jednaka M , a ako je to tačno, dobra provera je i

da li se same matrice iz gornje jednakosti sabiraju u I (jer je $\sum |i\rangle\langle i| = I$). Ako su oba kriterijuma zadovoljena, a jesu, možemo da pređemo na sledeći deo zadatka. Tako je

$$\begin{aligned}\sqrt{M} &= \sqrt{-3} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \sqrt{-1} \cdot \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & -1/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} + \sqrt{5} \cdot \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{5+i}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{5-i}}{2} \\ 0 & i\sqrt{3} & 0 \\ \frac{\sqrt{5-i}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{5+i}}{2} \end{pmatrix} \\ \ln M &= \ln(-3) \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \ln(-1) \cdot \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & -1/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} + \ln 5 \cdot \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\ln 5 + i\pi}{2} & 0 & \frac{\ln 5 - i\pi}{2} \\ 0 & i\pi + \ln 3 & 0 \\ \frac{\ln 5 - i\pi}{2} & 0 & \frac{\ln 5 + i\pi}{2} \end{pmatrix} \\ \sin M &= \sin(-3) \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \sin(-1) \cdot \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & -1/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} + \sin 5 \cdot \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\sin 5 - \sin 1}{2} & 0 & \frac{\sin 5 + \sin 1}{2} \\ 0 & -\sin 3 & 0 \\ \frac{\sin 5 + \sin 1}{2} & 0 & \frac{\sin 5 - \sin 1}{2} \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Ovde je određena i vrednost od $\ln(-1)$. Na osnovu Euler-ove formule imamo da je

$$-1 = e^{i\pi} \Rightarrow \ln(-1) = i\pi.$$

Onda se lako nalazi da je

$$\ln(-3) = \ln((-1) \cdot 3) = \ln(-1) + \ln 3 = i\pi + \ln 3.$$

Ostatak računa je pravolinijski.

3.14 Elemente ortonormiranog bazisa reprezentujemo kao trodimenzionalni apsolutni bazis (to je izomorfizam, verna reprezentacija):

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Onda je

$$A|1\rangle = 2|1\rangle + |2\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

što nam daje prvu kolonu matrice A . Preostale dve kolone matrice A dobijamo njenim delovanjem na drugi i treći bazisni vektor. Na kraju se dobija da je

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Rešavanjem svojstvenog problema ove matrice dobijaju se svojstvene vrednosti $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 3$ i $\lambda_3 = 4$, a odgovarajući svojstveni vektori su

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |v_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

3.15 Evolucija sistema određena je delovanjem evolucionog operatora na početno stanje

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi(0)\rangle.$$

Pošto je H hermitski operator, svojstveni vektori hamiltonijana

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle.$$

čine bazis u prostoru stanja. Ako početno stanje napišemo preko svojstvenih stanja hamiltonijana

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle,$$

lako određujemo evoluciju. Naime,

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|n\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle,$$

jer je

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|n\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right)^k |n\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)^k |n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle.$$

Rešavanjem svojstvenog problema matrice H , dobijamo da su svojstvene vrednost

$$\lambda_1 = \hbar\omega, \quad \lambda_2 = 2\hbar\omega, \quad \lambda_3 = 3\hbar\omega, \quad \lambda_4 = 4\hbar\omega$$

dok su odgovarajući svojstveni vektori

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad |4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -i \end{pmatrix}.$$

Koeficijenti c_n su

$$c_n = \langle n|\psi(0)\rangle,$$

ili konkretno

$$c_1 = \frac{1}{2\sqrt{3}}, \quad c_2 = \frac{i}{2\sqrt{3}}, \quad c_3 = \frac{3-i}{2\sqrt{6}}, \quad c_4 = \frac{3-i}{2\sqrt{6}}$$

U trenutku t , stanje je

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2\sqrt{3}} e^{-i\omega t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{i}{2\sqrt{3}} e^{-2i\omega t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{3-i}{4\sqrt{3}} e^{-3i\omega t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix} + \frac{3-i}{4\sqrt{3}} e^{-4i\omega t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -i \end{pmatrix}.$$

Talasna funkcija je periodična funkcija od vremena. U prvom sabirku zavisnost $e^{i\omega t} = \cos \omega t + i \sin \omega t$ ima period $T_1 = 2\pi/\omega$. Periodi preostalih sabiraka su $T_2 = \pi/\omega$, $T_3 = 2\pi/(3\omega)$ i $T_4 = \pi/(2\omega)$. Najmanji zajednički sadržalac od $\{T_1, T_2, T_3, T_4\}$ je T_1 tako da se sistem u početno stanje vraća nakon vremena

$$T = \frac{2\pi}{\omega}.$$

3.16 Matričnu reprezentaciju operatora možemo da odredimo na dva načina. Prvi način je da odredimo delovanje operatora na bazisne vektore. Na primer:

$$A|1\rangle = 22a|1\rangle \underbrace{\langle 1|1\rangle}_1 - 6ia|2\rangle \underbrace{\langle 1|1\rangle}_1 + 6ia|1\rangle \underbrace{\langle 2|1\rangle}_0 + 13a|2\rangle \underbrace{\langle 2|1\rangle}_0 = 22a|1\rangle - 6ia|2\rangle,$$

isto tako za bazisni vektor $|2\rangle$ i onda se računa na isti način kao u prethodnim zadacima. Drugi način je da izračunamo tenzorske proizvode

$$|1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$|1\rangle\langle 2| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle\langle 2| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

pa su operatori

$$A = \begin{pmatrix} 22a & 6ia \\ -6ia & 13a \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 11b & 8ib \\ -8ib & -b \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 9c & -3ic \\ 3ic & c \end{pmatrix}.$$

a) Da bi opservabla bila kompatibilna sa A , treba da komutira sa A . Pošto je

$$[A, B] = 0, \quad [A, C] = -75iac \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

vidimo da B jesta a C nije kompatibilna sa A .

b) Merenjem opservable A kao rezultati se mogu dobiti svojstvene vrednosti matrice A . Rešavanjem svojstvenog problem matrice A nalazimo da su svojstvene vrednosti $a_1 = 10a$ i $a_2 = 25a$. Svojstveni vektori su

$$|a_1 = 10a\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2i \end{pmatrix}, \quad |a_2 = 25a\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 2i \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Pošto je rezultat merenja $10a$ onda je nakon merenja čestica u stanju

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2i \end{pmatrix}.$$

c) Rešavanjem svojstvenog problema matrice B dobijamo svojstvene vrednosti i vektore

$$|b_1 = -5b\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2i \end{pmatrix}, \quad |b_2 = 15b\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 2i \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Kao što vidimo, svojstveni vektori matrica A i B su jednaki. Ako je sistem u svojstvenom stanju od A , merenjem opservable B to stanje neće biti promenjeno. Zato A i B jesu kompatibilne opservable. Pošto je čestica u svojstvenom stanju opservable B , kojoj odgovara svojstvena vrednost $-5b$ merenje B će se dati rezultat $-5b$.

d) Rešenje svojstvenog problema matrice C je

$$|c_1 = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} i \\ 3 \end{pmatrix}, \quad |c_2 = 10c\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} 3 \\ i \end{pmatrix}.$$

Čestica je u stanju koje je linearna kombinacija ova dva stanja

$$|\psi\rangle = \langle c_1|\psi\rangle|c_1\rangle + \langle c_2|\psi\rangle|c_2\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}|c_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|c_2\rangle.$$

Merenjem opservable C dobiće se rezultat 0 ili $10c$. Verovatnoće za dobijanje pojedinačnih rezultata na osnovu Born-ovog postulata su:

$$\text{ver}(C, 0) = \left| \frac{i}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} = 50\%, \quad \text{ver}(C, 10c) = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} = 50\%.$$

3.17 Svojstvena stanja hamiltonijana H zadovoljavaju

$$H|\psi_1\rangle = E_1|\psi_1\rangle, \quad H|\psi_2\rangle = E_2|\psi_2\rangle.$$

- a) U zadatku 3.4 pokazano je da su svojstvena stanja hermitskog operatora koja odgovaraju različitim svojstvenim vrednostima međusobno ortogonalna. Pošto je H hermitski operator čijim svojstvenim stanjima $|\psi_1\rangle$ i $|\psi_2\rangle$ odgovaraju različite svojstvene vrednosti $E_1 \neq E_2$, onda je

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0.$$

- b) Reprezentujemo svojstvene vektore hamiltonijana kao apsolutni bazis:

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

U tom bazisu, opservabla A se reprezentuje kao

$$A|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle \Rightarrow A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$A|\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle \Rightarrow A \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

pa je

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Svojstvena stanja operatora A nalazimo rešavanjem svojstvenog problema matrice A (a to je već urađeno u zadatku 3.12). Da se podsetimo, dobijene su svojstvene vrednosti $\lambda_1 = -1$ i $\lambda_2 = 1$ i odgovarajuća svojstvena stanja su:

$$|\lambda = -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |\lambda = 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

- c) Početno stanje je napisano u svojstvenom bazisu hamitonijana

$$|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle),$$

pa je u kasnijem trenutku t funkcija stanja:

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} |\psi_1\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} |\psi_2\rangle \right).$$

Verovatnoća da se u trenutku t sistem nađe u početnom stanju je

$$\begin{aligned} \text{ver}(|\Psi(t)\rangle = |\Psi(t=0)\rangle) &= |\langle\Psi(t=0)|\Psi(t)\rangle|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2} (\langle\psi_1| + \langle\psi_2|) \left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t}|\psi_1\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t}|\psi_2\rangle \right) \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t} + e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t} \right) \right|^2 \\ &= \frac{\left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t} + e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t} \right) \left(e^{\frac{i}{\hbar}E_1t} + e^{\frac{i}{\hbar}E_2t} \right)}{4} \\ &= \frac{1 + \cos \frac{(E_1-E_2)t}{\hbar}}{2} = \cos^2 \frac{(E_1-E_2)t}{2\hbar} \end{aligned}$$

3.18 Merenjem energije dobijen je rezultat E_v , tako da se posle tog merenja sistem nalazi u stanju $|v\rangle$.

a) Očekivana vrednost od $\langle A \rangle$ u stanju $|v\rangle$ je

$$\langle A \rangle = \langle v|A|v\rangle = \sum_{n,k} \langle v|n\rangle \langle n|A|k\rangle \langle k|v\rangle$$

Ovde smo iskoristili činjenicu da je pomoću svojstvenih vektora operatora A moguće razložiti jedinicu $\sum_n |n\rangle \langle n| = I$. Pošto je $A|k\rangle = a_k|k\rangle$ i $\langle n|k\rangle = \delta_{nk}$, dobijamo da je

$$\langle A \rangle = \sum_n |\langle v|n\rangle|^2 a_n.$$

Dok je sistem u stanju $|v\rangle$ verovatnoće da se dobije rezultat a_m je

$$\text{ver}_A(a_m, |v\rangle) = |\langle v|m\rangle|^2$$

b) Posle merenja opservable A dobijen je rezultat a_m , tako da se sistem nalazi u stanju $|m\rangle$. To je sad početno stanje i odredićemo kako ono dalje evoluira. Evolucija stanja određena je sa

$$|\psi(t)\rangle = \sum_v c_v e^{-\frac{i}{\hbar}E_v t} |v\rangle.$$

Konstante c_v određujemo iz početnog uslova

$$|\psi(t=0)\rangle = |m\rangle = \sum_v c_v |v\rangle \Rightarrow \langle v'|m\rangle = c_{v'}.$$

Stoga je stanje u kasnijem trenutku dato sa

$$|\psi(t)\rangle = \sum_v \langle v|m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_v t} |v\rangle.$$

Verovatnoća da se u trenutku t merenjem opservable A dobije isti rezultat a_m jednak je:

$$\text{ver}_A(a_m, |\psi(t)\rangle) = |\langle m|\psi(t)\rangle|^2 = \left| \sum_v \langle v|m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_v t} \right|^2.$$

3.19 Matrični elementi gornjih trougaonih matrica jednaki su 0 na dijagonali i ispod nje. Razmotrimo tri gornje trougaonu matrice:

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad p = \frac{1}{i\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Pokažimo da one zadovoljavaju sledeće komutacione relacije

$$[x, p] = iX, \quad [x, X] = 0, \quad [p, X] = 0.$$

Pošto je

$$xp = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{i\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

kao i

$$px = \frac{1}{i\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

vidimo da je komutator

$$[x, p] = i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = iX. \checkmark$$

Pošto je

$$xX = Xx = pX = Xp = 0,$$

onda važe i druga dva komutatora koje je trebalo dokazati.

3.20 Skalarni proizvod na Bohr-ovoj kompakfikaciji realne ose je

$$\langle \psi | \phi \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \int_{-L}^L \psi^*(x) \phi(x) dx.$$

Pogledamo čemu je jednak skalarni proizvod ravnih talasa $\psi_p(x) = e^{ipx}$

$$\langle p_i | p_j \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \int_{-L}^L e^{-ip_i x} e^{ip_j x} dx.$$

Ako je $p_i = p_j$ ovaj skalarni proizvod je

$$\langle p_i | p_i \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \int_{-L}^L dx = \lim_{L \rightarrow \infty} 1 = 1,$$

dok je za $p_i \neq p_j$

$$\begin{aligned} \langle p_i | p_j \rangle &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \int_{-L}^L e^{-i(p_i - p_j)x} dx \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \frac{i}{(p_i - p_j)} \left(e^{-i(p_i - p_j)L} - e^{i(p_i - p_j)L} \right) \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin(p_i - p_j)L}{(p_i - p_j)L} = 0 \end{aligned}$$

jer je brojilac ograničena funkcija u limesu $L \rightarrow \infty$. Prema tome, vidimo da je

$$\langle p_i | p_j \rangle = \delta_{ij}.$$

3.21 Indekse defekta operatora $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ odredićemo tako što ćemo prebrojati normalizabilna rešenja jednačine

$$-i\hbar \frac{d}{dx} \psi_{\pm} = \pm i \psi_{\pm}$$

na odgovarajućim intervalima. Najpre rešavamo jednačinu

$$\frac{d\psi}{\psi} = \mp \frac{1}{\hbar} dx \Rightarrow \psi_{\pm} = C_{\pm} e^{\mp \frac{x}{\hbar}}.$$

a) Ako posmatramo čitavu realnu osu, oba rešenja imaju beskonačnu normu:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_{\pm}|^2 = |C_{\pm}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\mp \frac{2x}{\hbar}} = \mp \frac{\hbar}{2} |C_{\pm}|^2 e^{\mp \frac{2x}{\hbar}} \Big|_{-\infty}^{\infty} = +\infty.$$

Prema tome, pošto na intervalu $(-\infty, \infty)$ nema normalizabilnih rešenja, indeksi defekta su $n_{\pm} = 0$.

b) Na konačnom intervalu $(0, 2\pi)$ moguće je pronaći po jedno normalizabilno stanje za svaku svojstvenu vrednost. Ako odredimo integral

$$\int_0^{2\pi} dx |\psi_{\pm}|^2 = |C_{\pm}|^2 \int_0^{2\pi} dx e^{\mp \frac{2x}{\hbar}} = \frac{\hbar}{2} |C_{\pm}|^2 \left(\pm e^{\pm \frac{4\pi}{\hbar}} \mp 1 \right),$$

vidimo da su

$$C_{\pm} = \sqrt{\frac{2}{\hbar(\pm e^{\pm \frac{4\pi}{\hbar}} \mp 1)}},$$

a to su dve realne, konačne konstante. Dakle, indeksi defekta za operator diferenciranja na konačnom intervalu su $n_{\pm} = 1$.

c) Kao i u prethodnim slučajevima, računamo integral:

$$\int_0^{\infty} dx |\psi_{\pm}|^2 = |C_{\pm}|^2 \int_0^{\infty} dx e^{\mp \frac{2x}{\hbar}} = \frac{\hbar}{2} |C_{\pm}|^2 \left\{ \begin{array}{l} 1 \\ \infty \end{array} \right.,$$

na osnovu čega vidimo da za svojstveno stanje $+i$ imamo jedno normalizabilno rešenje, dok ih za $-i$ nema, pa su indeksi defekta $(1, 0)$.

3.22 Pokazaćemo ove identitete koristeći različite reprezentacije δ -funkcije.

a) Identitet

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0),$$

je jedna od najvažnijih osobina δ -funkcije koja se najčešće koristi. Ovo je zapravo definiciona osobina δ -funkcije, a da bismo razvili intuiciju o δ -funkciji i videli kako se ona uklapa u ono što već znamo o integralima dokazaćemo "ovu jednakost pomoću najjednostavnijeg limesa δ -funkcije. Pokažimo da se δ -funkcija može uzeti kao

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta(x, \epsilon),$$

gde je

$$\delta(x, \epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon}, & x \in \left(-\frac{\epsilon}{2}, \frac{\epsilon}{2}\right) \\ 0, & x \notin \left(-\frac{\epsilon}{2}, \frac{\epsilon}{2}\right) \end{cases}$$

Lako se proverava da je

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x, \epsilon) dx = \int_{-\epsilon/2}^{\epsilon/2} \frac{1}{\epsilon} dx = 1,$$

kao i da je u limesu $\epsilon \rightarrow 0$ funkcija $\delta(x, \epsilon)$ svuda 0 izuzev u $x = 0$ gde je beskonačna. Zato možemo da pišemo da je

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta(x, \epsilon) f(x) dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x, \epsilon) f(x) dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon/2}^{\epsilon/2} \frac{1}{\epsilon} f(x) dx.$$

Neka je $F'(x) = f(x)$. Tada je poslednji integral

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon/2}^{\epsilon/2} \frac{1}{\epsilon} \frac{dF(x)}{dx} dx \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} F(x) \Big|_{-\epsilon/2}^{\epsilon/2} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F(\epsilon/2) - F(-\epsilon/2)}{\epsilon} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} F'(-\epsilon/2) = F'(0) = f(0). \end{aligned}$$

To je prva stvar koju je trebalo dokazati. Potražimo čemu je jednak integral

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

Uvedemo smenu $x - a = y$ pa je $dx = dy$ i onda imamo

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(y) f(y + a) dy = f(a)$$

Inače, δ -funkcija nije prava funkcija. Ona je zapravo raspodela i jednačina

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0)$$

je njena definicija. Iz te definicije sledi (kad uzmemo da je $f(x) = 1$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1.$$

U tom smislu je $\delta(x - a)$ druga raspodela, $\delta(-x)$ treća, $\delta'(x)$ četvrta... Raspodele se uvek definišu delovanjem na funkciju i mogu se posmatrati kao uopštenje dualnog vektora. U linearnoj algebri skalarni proizvod je definisan sa $(u, v) = \sum_i u_i^* v_i$ gde se sumira po svim komponentama vektora. Drugi vektor u ovoj sumi je "običan" vektor, kolona, a prvi nazivamo dualan i to je vrsta. U slučaju funkcija, uopštenje sume je integral pa je skalarni proizvod

$$(f(x), g(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) g(x) dx.$$

Ako je dualni vektor takav da delujući na funkciju daje sledeći skalarni proizvod

$$(\delta(x), f(x)) = f(0)$$

onda smo definisali δ -funkciju kao dualni vektor i to je kad se napiše preko integrala izraz kojeg smo već dokazali" a zapravo je defincija veličine koju nazivamo Dirac-ov delta funkcija.

- b)** Osobina $\delta(-x) = \delta(x)$ kaže da je δ -funkcija parna. Ako je posmatramo kao raspodelu, onda je

$$\begin{aligned} (\delta(-x), f(x)) &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(-x) f(x) dx = - \int_{\infty}^{-\infty} \delta(x) f(-x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(-x) dx = f(0) = (\delta(x), f(x)), \end{aligned}$$

čime je tražena osobina dokazana. Drugi način da dokažemo parnost δ -funkcije je da posmatramo limese koji dovode do δ -funkcije. Svi članovi niza koji dovode do δ -funkcije su parni, pa je i granična vredost (δ -funkcija) parna.

- c)** Ispitajmo osobine raspodele $\delta'(x)$:

$$(\delta'(x), f(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x) f(x) dx = \delta(x) f(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f'(x) dx = -f'(0).$$

Ovde je izvršena parcijalna integracija i iskorišćena osobina $\delta(\pm\infty) = 0$.

- d)** Izvod δ -funkcije je neparna funkcija (to i nije čudno jer je izvod parne funkcije neparna funkcija, ali ipak je to δ -funkcija pa treba biti oprezan i proveriti). Krenimo od

$$\begin{aligned} (\delta'(-x), f(x)) &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(-x) f(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x) f(-x) dx \\ &= \delta(x) f(-x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \frac{df(-x)}{dx} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \frac{df(-x)}{d(-x)} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f'(x) dx \\ &= f'(0) = -(\delta'(x), f(x)) = (-\delta'(x), f(x)), \end{aligned}$$

tako da je

$$\delta'(-x) = -\delta'(x),$$

što je tražena osobina.

- e)** Razmotrimo sledeći izraz i izvršimo parcijalnu integraciju

$$(x\delta'(x), f(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} x\delta'(x) f(x) dx$$

$$\begin{aligned}
 &= x\delta(x)f(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)(f(x) + xf'(x)) dx = -f(0) \\
 &= -(\delta(x), f(x))
 \end{aligned}$$

što daje traženu jednakost

$$x\delta'(x) = -\delta(x).$$

Ovde smo pretpostavili da je funkcija $f(x)$ takva, da u beskonačnosti izraz $x\delta(x)f(x)$ ide u nulu.

f) Ispitajmo kako se ponaša raspodela $\delta(bx)$ za $b > 0$:

$$\begin{aligned}
 (\delta(bx), f(x)) &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(bx)f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(y)f\left(\frac{x}{b}\right) \frac{dx}{b} \\
 &= \frac{1}{b}f(0) = \frac{1}{b} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)f(x) dx \\
 &= \frac{1}{b}(\delta(bx), f(x)).
 \end{aligned}$$

Ovde smo uveli smenu $y = bx$ i videli na šta se svodi integral. Isto ćemo postupiti i u slučaju $b < 0$, ali tu imamo jednu bitnu razliku: granice integracije se sad menjaju, pa imamo

$$\begin{aligned}
 (\delta(bx), f(x)) &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(bx)f(x) dx = \int_{\infty}^{-\infty} \delta(y)f\left(\frac{x}{b}\right) \frac{dx}{b} = - \int_{-\infty}^{\infty} \delta(y)f\left(\frac{x}{b}\right) \frac{dx}{b} \\
 &= -\frac{1}{b}f(0) = -\frac{1}{b} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)f(x) dx \\
 &= -\frac{1}{b}(\delta(bx), f(x)).
 \end{aligned}$$

Ove dve jednakosti možemo napisati u jednoj jednačini:

$$\delta(bx) = \frac{\delta(x)}{|b|},$$

što je trebalo pokazati.

g) Heaviside-ova funkcija je definisana sledećom jednakošću

$$\theta(x-a) = \begin{cases} 1, & x > a \\ 0, & x < a \end{cases}.$$

Iz ove definicije vidimo da kako idemo duž x -ose njena vrednost je 0 a onda u jednoj tački $x = a$ skoči na 1, posle čega se ne menja. Naš zadatak je da pokažemo da je

$$\theta'(x-a) = \delta(x-a).$$

Razmotrimo sledeću funkciju

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

Ako je $x < a$ podintegralna funkcija je 0, pa je i integral 0, odnosno $f(x) = 0$. S druge strane, za $x > a$ argument δ -funkcije je postao 0 u granicama integracije, pa je odgovarajući integral 1. Zato je za $x > a$ vrednost funkcije $f(x) = 1$. Ako uporedimo $f(x)$ i Heaviside-ovu θ -funkcije, vidimo da su one jednake, pa možmo da napišemo da je

$$\theta(x-a) = \int_{-\infty}^x \delta(x'-a) dx'.$$

Diferencirajući ovaj izraz po x dobijamo traženi izraz

$$\theta'(x-a) = \delta(x'-a).$$

h) Integral

$$\int_b^c \delta(x-a) dx$$

će biti jednak 1 ako je argument δ -funkcije jednak 0 unutar intervala po kome se integriše. U suprotnom vrednost integrala je 0. Dakle, integral je 1 ako je $b < a < c$. Razmotrimo sad proizvod dve Heaviside-ove funkcije $\theta(c-a)\theta(a-b)$. Ovaj izraz je proizvod dve jedinice ako je $c > a$ i $a > b$ (inače je 0, jer je bar jedna od Heaviside-ovih funkcija 0), a to je ista stvar kao i produžena jednakost koja je važila kad je integral δ -funkcije 1. Prema tome, ove dve funkcije su jednake, odnosno možemo da pišemo da je

$$\int_b^c \delta(x-a) dx = \theta(c-a)\theta(a-b).$$

3.23 Skalarni proizvod $\langle x|\psi\rangle$ definisan je za dato stanje $|\psi\rangle$ u svakoj tački x , tako da je to zapravo neka funkcija. Ta funkcija se naziva funkcija stanja $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$. Iskoristimo definiciju δ -funkcije, tad možemo da pišemo da je

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \delta(x-y)\psi(y).$$

Pošto su stanja $|x\rangle$ normirana na δ -funkciju onda je $\langle x|y\rangle = \delta(x-y)$ pa iz gornje jednakosti imamo da je

$$\langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dy \langle x|y\rangle \langle y|\psi\rangle = \langle x| \int_{-\infty}^{\infty} dy |y\rangle \langle y|\psi\rangle.$$

Ovde smo iskoristili da $\langle x|$ ne zavisi od y pa se može izvući ispred integrala. U poslednjoj jednakosti prepoznajemo da je

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy |y\rangle \langle y| = I$$

što predstavlja razlaganje jedinice.

3.24 Dirac-ova δ -funkcija može se posmatrati i kao generalisana funkcija. To znači da se ona dobija kao limes dvoparametarskih funkcija (jedan parametar je nezavisno promenljiva x a drugi onaj po kome se traži granična vrednost). Razmotrimo tako dvoparametarsku funkciju

$$\delta(x, \alpha) = \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}}.$$

Pokazaćemo da u limesu $\alpha \rightarrow 0$ ova funkcija za $x \neq 0$ postaje 0, u $x = 0$ teži u beskonačno, širina centralnog pika se smanjuje i integral po realnoj osi je 1. Funkcije $\delta(x, \alpha)$ su Gauss-ove raspodele, normirane pa je za svako α

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x, \alpha) dx = 1,$$

centrirane oko nule, sa disperzijom (koja određuje širinu raspodele) $\Delta x = \sqrt{2}\alpha/2$. Kada $\alpha \rightarrow 0$ širina raspodele na kojoj je funkcija nenulta ide u nulu, dok vrednost funkcije za $x = 0$ postaje jako velika. Prema tome, pokazali smo da je

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}}.$$

Uzmimo u razmatranje sad niz funkcija

$$\delta_n(x) = \frac{\sin nx}{\pi x}, \quad (n \in \mathbb{N}).$$

Ovaj niz funkcija takođe daje δ -funkciju

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

Najpre ćemo pokazati da je

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} \delta_n(x) dx = 1.$$

Uočimo da je za $x > 0$

$$\int_0^{\infty} e^{-xy} \sin nx dy = \sin nx \frac{1}{-x} e^{-xy} \Big|_{y=0}^{y=\infty} = \frac{\sin nx}{x}$$

Sad je moguće I_n napisati na drugačiji način

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin nx}{\pi x} dx = 2 \int_0^{\infty} \frac{\sin nx}{\pi x} dx = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dx \int_0^{\infty} dy e^{-xy} \sin nx.$$

Najpre smo iskoristili parnost podintegralne funkcije, a potom smo iskoristili formulu koju smo dokazali u prethodnom redu. Sad ćemo promeniti redosled integracije

$$I_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dy \int_0^{\infty} dx e^{-xy} \sin nx = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dy I_n(y)$$

gde smo uveli pomoćni integral (koji je podintegralna funkcija integrala po y).

$$I_n(y) = \int_0^{\infty} dx e^{-xy} \sin nx$$

Ovaj integral ćemo izračunati parcijalnom integracijom. Neka je $u = e^{-xy}$ i $dv = \sin nx dx$

$$I_n(y) = -e^{-xy} \frac{\cos nx}{n} \Big|_{x=0}^{x=\infty} + \int_0^{\infty} dx y e^{-xy} \frac{1}{n} \cos nx = \frac{1}{n} - \frac{y}{n} \int_0^{\infty} e^{-xy} \cos nx dx.$$

U preostalom integralu izvršimo još jednu parcijalnu integraciju pa ćemo dobiti

$$I_n(y) = \frac{1}{n} - \frac{y}{n} \left(e^{-xy} \frac{\sin nx}{n} \Big|_{x=0}^{x=\infty} + \frac{y}{n} \int_0^{\infty} dx e^{-xy} \sin nx \right) = \frac{1}{n} - \frac{y^2}{n^2} I_n(y),$$

pa je

$$I_n(y) = \frac{\frac{1}{n}}{1 + \frac{y^2}{n^2}}.$$

Vratimo se na ceo integral, on se sad svodi na tablični

$$I_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\frac{1}{n}}{1 + \frac{y^2}{n^2}} dy = \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{y}{n} \Big|_0^{\infty} = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{\pi}{2} = 1.$$

Integral I_n se može relativno jednostavno izračunati na drugačiji način i u tome će nam pomoći δ -funkcija. Naime, primetimo najpre da je

$$\int_{-1}^1 e^{inkx} dk = \frac{1}{inx} (e^{inx} - e^{-ikx}) = \frac{2 \sin nx}{nx}.$$

Stoga je naš integral

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin nx}{\pi x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{n}{2\pi} \int_{-1}^1 e^{inkx} dk = \int_{-1/n}^{1/n} dk' \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ik'x} = \int_{-1/n}^{1/n} dk' \delta(k') = 1.$$

Ovde smo upotrebili gornje zapažanje, pa smo obrnuli redosled integracije i izvršili smenu promenjive $k' = nk$, iskoristili smo Fourier transform δ -funkcije

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx}$$

a poslednji korak je bio trivijalan. Na koji god način da smo izračunali integral I_n vidimo da je on uvek 1, tako da će i u limesu kad $n \rightarrow \infty$ takođe biti 1. Dakle, imaćemo da je

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_n(x) dx = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1.$$

Širinu intervala na kome je $\delta_n(x)$ različito od 0 možemo proceniti na π/n i to teži ka 0 kako $n \rightarrow \infty$. Vrednost funkcije je obrnuto srazmerna sa x pa je ona u unutar intervala širine π/n srazmerna sa n , odnosno kad je n jako veliko i vrednost funkcije oko 0 je velika. Prema tome, i ovaj niz funkcija u graničnom slučaju daje $\delta(x)$.

3.25 Određivanje vrednosti integrala kada u podintegralnoj funkciji imamo i δ -funkciju je jednostavan problem. Ako je tačka u kojoj je argument δ -funkcije nula unutar granica integracije, onda je vrednost integrala jednaka ostatku podintegralne funkcije u toj tački. Ukoliko je argument δ -funkcije nije nula unutar intervala integracije, podintegralna funkcija je nula (zbog δ -funkcije) pa je i integral jednak 0. Da vidimo to na nekoliko jednostavnih primera

$$\text{a) } \int_{-1}^1 \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) \delta(x) dx = \cos 0 = 1,$$

$$\text{b) } \int_{-2}^3 (|x| + e^x) \delta(x+1) dx = |-1| + e^{-1} = 1 + \frac{1}{e},$$

$$\text{c) } \int_0^{\infty} \sin^7(\pi x) \underbrace{\delta(2x+3)}_{\frac{1}{2}\delta(x+\frac{3}{2})} dx = \frac{1}{2} \sin^7 \frac{3\pi}{2} = -\frac{1}{2},$$

$$\text{d) } \int_2^9 \frac{e^x}{\sqrt{1+x^2}} \delta(x-1) dx = 0 \text{ jer tačka } x = 1 \text{ ne pripada intervalu integracije.}$$

3.26 Komutator linearnih operatora A i B definiše se kao nov linearni operator

$$[A, B] = AB - BA.$$

Zbog toga što operatori ne komutiraju, ova struktura je netrivialna.

a) Komutator je antisimetričan na zamenu redosleda operatora

$$[A, B] = -[B, A].$$

To se lako dokazuje

$$[A, B] = AB - BA = -(BA - AB) = -[B, A].$$

b) Ako je jedan od operatora u komutatoru dat kao linearna kombinacija, onda je

$$[aA + bB, C] = a[A, C] + b[B, C].$$

Pošto su a i b brojevi (koji komutiraju sa operatorima) onda je

$$[aA + bB, C] = (aA + bB)C - C(aA + bB) = a(AC - CA) + b(BC - CB) = a[A, C] + b[B, C].$$

Na isti način može da se dokaže i da je

$$[A, bB + cC] = b[A, B] + c[A, C].$$

c) Ukoliko je jedan od operatora dat kao proizvod, tada je

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C], \quad [AB, C] = A[B, C] + [A, C]B.$$

Dokazaćemo prvu jednakost:

$$\begin{aligned} [A, BC] &= ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA = (AB - BA)C + B(AC - CA) \\ &= [A, B]C + B[A, C] \end{aligned}$$

d) Jacobi-jev identitet je sledeća relacija

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0.$$

Pogledajmo čemu je jednak prvi sabirak:

$$[A, [B, C]] = [A, BC - CB] = ABC - BCA - ACB + CBA.$$

Analogno su

$$[B, [C, A]] = BCA - CAB - BAC + ACB, \quad [C, [A, B]] = CAB - ABC - CBA + BAC.$$

Kad saberemo ove jednačine, vidimo da se na desnoj strani svi članovi potiru, čime je dokazan Jacobi-jev identitet. Uočimo sličnost između osobina komutatora i Poisson-ovih zagrada (zadatak 1.1).

3.27 Heisenberg-ovu algebru čine tri operatora $\{x, p, C\}$ koji zadovoljavaju komutacione relacije

$$[x, p] = iC, \quad [x, C] = 0, \quad [p, C] = 0.$$

a) Ako je S verna reprezentacija Heisenberg-ove algebre onda važi

$$[S(x), S(p)] = iS(C), \quad [S(x), S(C)] = 0, \quad [S(p), S(C)] = 0.$$

Proverimo ove komutacione relacije

$$\begin{aligned} [S(x), S(p)] &= \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= iS(C). \end{aligned}$$

Istovetno se pokazuju i ostali komutatori

$$\begin{aligned} [S(x), S(C)] &= \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ [S(p), S(C)] &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

b) U prostoru diferencijalbilnih funkcija $f(x, p, C)$, verna reprezentacija ρ treba da zadovoljava

$$[\rho(x), \rho(p)] f(x, p, C) = i\rho(C)f(x, p, C),$$

$$[\rho(x), \rho(C)] f(x, p, C) = 0,$$

$$[\rho(p), \rho(C)] f(x, p, C) = 0.$$

Provera ovakve vrste relacija je lakša ako se napiše i funkcija na koju operatori deluju. Pošto je ta funkcija proizvoljna, na taj način se ne gubi ništa od opštosti

$$\begin{aligned} [\rho(x), \rho(p)] f &= \rho(x)\rho(p)f - \rho(p)\rho(x)f \\ &= -\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{2}p\frac{\partial}{\partial C}\right)\left(\frac{\partial f}{\partial p} + \frac{1}{2}x\frac{\partial f}{\partial C}\right) + \left(\frac{\partial}{\partial p} + \frac{1}{2}x\frac{\partial}{\partial C}\right)\left(\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{1}{2}p\frac{\partial f}{\partial C}\right) \\ &= -\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial p} - \frac{1}{2}\frac{\partial f}{\partial C} - \frac{1}{2}x\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial C} + \frac{1}{2}p\frac{\partial^2 f}{\partial C \partial p} + \frac{1}{4}px\frac{\partial^2 f}{\partial C^2} \\ &\quad + \frac{\partial^2 f}{\partial p \partial x} - \frac{1}{2}\frac{\partial f}{\partial C} - \frac{1}{2}p\frac{\partial^2 f}{\partial p \partial C} + \frac{1}{2}x\frac{\partial^2 f}{\partial C \partial x} - \frac{1}{4}px\frac{\partial^2 f}{\partial C^2} \\ &= -\frac{\partial f}{\partial C} = i\rho(C)f \\ [\rho(x), \rho(C)] f &= \rho(x)\rho(C)f - \rho(C)\rho(x)f \\ &= -\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{2}p\frac{\partial}{\partial C}\right)\frac{\partial f}{\partial C} + \frac{\partial}{\partial C}\left(\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{1}{2}p\frac{\partial f}{\partial C}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial C} + \frac{1}{2} p \frac{\partial^2 f}{\partial C^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial C \partial x} - \frac{1}{2} p \frac{\partial^2 f}{\partial C^2} = 0 \\
[\rho(p), \rho(C)] f &= \rho(p)\rho(C)f - \rho(C)\rho(p)f \\
&= -\left(\frac{\partial}{\partial p} + \frac{1}{2}x\frac{\partial}{\partial C}\right)\frac{\partial f}{\partial C} + \frac{\partial}{\partial C}\left(\frac{\partial f}{\partial p} + \frac{1}{2}x\frac{\partial f}{\partial C}\right) \\
&= -\frac{\partial^2 f}{\partial p \partial C} - \frac{1}{2}x\frac{\partial^2 f}{\partial C^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial C \partial p} - \frac{1}{2}x\frac{\partial^2 f}{\partial C^2} = 0
\end{aligned}$$

3.28 Kao što znamo, n -to sopstveno stanje čestice između beskonačnih zidova u koordinatnoj reprezentaciji je

$$\langle x|n\rangle = \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}.$$

a) U impulsnoj reprezentaciji n -to svojstveno stanje je

$$\langle k|n\rangle = \tilde{\psi}_n(k) = \langle k|\int_{-\infty}^{\infty} dx|x\rangle\langle x|n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\langle k|x\rangle\langle x|n\rangle = \int_0^a dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a},$$

jer je van intervala $(0, a)$ talasna funkcija jednaka 0. Dalje je

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}_n(k) &= \frac{1}{2i\sqrt{\pi a}} \int_0^a dx e^{-ikx} \left(e^{i\frac{n\pi}{a}x} - e^{-i\frac{n\pi}{a}x} \right) \\
&= \frac{1}{2i\sqrt{\pi a}} \left(\int_0^a dx e^{i(\frac{n\pi}{a}-k)x} - \int_0^a dx e^{-i(\frac{n\pi}{a}+k)x} \right) \\
&= \frac{1}{2i\sqrt{\pi a}} \left(\frac{-i}{\frac{n\pi}{a}-k} e^{i(\frac{n\pi}{a}-k)x} \Big|_0^a - \frac{i}{\frac{n\pi}{a}+k} e^{-i(\frac{n\pi}{a}+k)x} \Big|_0^a \right) \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi a}} \left(\frac{1 - e^{in\pi - ika}}{\frac{n\pi}{a} - k} + \frac{1 - e^{-in\pi - ika}}{\frac{n\pi}{a} + k} \right) \\
&= \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{1 - (-1)^n e^{-ika}}{n\pi - ka} + \frac{1 - (-1)^n e^{-ika}}{n\pi + ka} \right) \\
&= \sqrt{a\pi} \left(1 - (-1)^n e^{-ika} \right) \frac{n}{n^2\pi^2 - k^2 a^2}.
\end{aligned}$$

b) Gustina verovatnoće impulsa u osnovnom stanju je

$$|\tilde{\psi}_1(k)|^2 = a\pi \left(1 + e^{-ika} \right) \left(1 + e^{ika} \right) \frac{1}{(\pi^2 - k^2 a^2)^2} = \frac{4\pi a}{(\pi^2 - k^2 a^2)^2} \cos^2 \frac{ka}{2},$$

dok je u prvom pobuđenom stanju

$$|\tilde{\psi}_2(k)|^2 = a\pi \left(1 - e^{-ika} \right) \left(1 - e^{ika} \right) \frac{4}{(4\pi^2 - k^2 a^2)^2} = \frac{16\pi a}{(4\pi^2 - k^2 a^2)^2} \sin^2 \frac{ka}{2}.$$

c) U koordinatnoj reprezentaciji operator impulsa je $p = -i\hbar\partial/\partial x$ pa je očekivana vrednost impulsa

$$\langle p \rangle_{|1\rangle} = \int_0^a \psi_1^*(x) (-i\hbar) \psi_1'(x) dx = -\frac{2i\hbar}{a} \int_0^a \sin \frac{\pi x}{a} \cos \frac{\pi x}{a} dx = 0.$$

Ako računamo u impulsnoj reprezentaciji, impuls je mutiplikativan operator $p = \hbar k$ te imamo

$$\langle p \rangle_{|1\rangle} = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}_1^*(k) \hbar k \tilde{\psi}_1(k) dk = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{4k dk}{(\pi^2 - k^2 a^2)^2} \cos^2 \frac{ka}{2} = 0,$$

jer integralimo u simetričnom intervalu neparnu funkciju. Kao što vidimo, bez obzira koju reprezentaciju koristimo, dobijamo isti rezultat.

3.29 Da bismo dokazali Baker-Campbell-Hausdorff-ovu (BCH) formulu:

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots + \frac{1}{n!} \underbrace{[A, [A, \dots [A, B] \dots]]}_{n \times} + \dots$$

razmotrićemo operatorsku funkciju

$$F(x) = e^{xA} B e^{-xA}.$$

Kad stavimo da je $x = 1$ dobijamo našu polaznu funkciju. Ova funkcija može da se razvije u Taylor-ov red po nezavisnoj veličini x

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} F_n x^n.$$

pri čemu su koeficijenti u razvoju operatori $F_n = F^{(n)}(0) = F_n(A, B)$. Potražimo izvod funkcije $F(x)$

$$\frac{dF(x)}{dx} = A e^{xA} B e^{-xA} - e^{xA} B e^{-xA} A = AF(x) - F(x)A = [A, F(x)].$$

Koristeći Taylor-ova razvoj, prethodna relacija postaje

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} F_n x^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [F_n, A] x^n \Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} F_{n+1} x^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [A, F_n] x^n,$$

iz čega sledi rekurentna relacija

$$F_{n+1} = [A, F_n].$$

Da bismo dobili članove F_n iz ove relacije dovoljno nam je da znamo jedan član, a prvi lako nalazimo $F_0 = F(x=0) = B$. Onda su

$$F_1 = [A, F_0] = [A, B], \quad F_2 = [A, F_1] = [A, [A, B]], \quad \dots \quad F_n = [A, \underbrace{[A, [A, \dots [A, B] \dots]]}_{n \times}]$$

Kad stavimo da je $x = 1$, izjednačavajući funkciju i njen Taylor-ov razvoj dobijamo

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots + \frac{1}{n!} \underbrace{[A, [A, \dots [A, B] \dots]]}_{n \times} + \dots$$

što je i trebalo dokazati.

3.30 Razmotrimo operatorsku funkciju

$$G(x) = e^{xA} e^{xB}.$$

Izvod ove funkcije po promenljivoj x je

$$\frac{dG(x)}{dx} = A e^{xA} e^{xB} + e^{xA} B e^{xB}$$

$$\begin{aligned}
&= Ae^{xA}e^{xB} + e^{xA}Be^{-xA}e^{xA}e^{xB} \\
&= (A + e^{xA}Be^{-xA})e^{xA}e^{xB} \\
&= (A + e^{xA}Be^{-xA})G(x)
\end{aligned}$$

Primenom Baker-Campbell-Hausdorff-ove formule, koristeći osobinu da je $[A, [A, B]] = 0$ imamo da je

$$e^{xA}Be^{-xA} = B + x[A, B].$$

Prema tome, dobijamo da je

$$\frac{dG(x)}{dx} = (A + B + x[A, B])G(x).$$

Rešenje ove diferencijalne jednačine je

$$G(x) = e^{(A+B)x + \frac{1}{2}x^2[A, B]}.$$

Kad stavimo da je $x = 1$, dobijamo

$$G(1) = e^A e^B = e^{(A+B) + \frac{1}{2}[A, B]},$$

što je i trebalo pokazati.

3.31 'Clock' \hat{v} i 'shift' \hat{u} matrice su $n \times n$ matrice definisane kao

$$\hat{v} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q^2 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & q^{n-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & q^{n-1} \end{pmatrix}, \quad \hat{u} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

gde je $q = \exp(2\pi i/n)$.

a) Relacija $[\hat{u}, \hat{v}] = (q-1)\hat{v}\hat{u}$ ekvivalentna je sa

$$[\hat{u}, \hat{v}] = \hat{u}\hat{v} - \hat{v}\hat{u} = (q-1)\hat{v}\hat{u} \Rightarrow \hat{u}\hat{v} = q\hat{v}\hat{u}.$$

Proverićemo poslednju relaciju tako što ćemo izračunati $\hat{u}\hat{v}$ i $\hat{v}\hat{u}$

$$\begin{aligned}
\hat{u}\hat{v} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q^2 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & q^{n-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & q^{n-1} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & q & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q^2 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & q^{n-1} \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= q \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & q^{n-2} \\ q^{n-1} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
\hat{v}\hat{u} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q^2 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & q^{n-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & q^{n-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & q^{n-2} \\ q^{n-1} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Dakle, tačna je jednakost

$$\hat{u}\hat{v} = q\hat{v}\hat{u}.$$

- b) Relacije $\hat{u}^\dagger = \hat{u}^{-1}$ i $\hat{v}^\dagger = \hat{v}^{-1}$ znači da su clock i shift matrice unitarne. Proverićemo da li su $\hat{u}^\dagger\hat{u}$ i $\hat{v}^\dagger\hat{v}$ jednaki jediničnoj matrici. Zato ćemo najpre adjungovati matrice \hat{u} i \hat{v} . Primitimo i da je

$$q^* = \left(e^{i\frac{2\pi}{n}}\right)^* = e^{-i\frac{2\pi}{n}} = q^{-1} = q^{n-1}.$$

Zato su

$$\begin{aligned}
\hat{u}^\dagger &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix} \\
\hat{v}^\dagger &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q^2 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & q^{n-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & q^{n-1} \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & q^{n-1} & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q^{n-2} & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & q^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & q \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Sad nije teško proveriti da je

$$\hat{u}^\dagger \hat{u} = I, \quad \hat{v}^\dagger \hat{v} = I.$$

c) Izračunajmo kvadrat shift matrice

$$\hat{u}^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Sad vidimo zašto se ova matrica zove shift. Ona pomera red jedinica duž dve dijagonale na kojima su jedinice za jedno mesto. Kad se to uradi još $n - 2$ puta donja dijagonala će se poklopiti sa glavnom dijagonalom i dobićemo jediničnu matricu. Clok matrica ima samo dijagonalne članove, pa njen n -ti stepen možmo odmah da računamo

$$\hat{v}^n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & q^n & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q^{2n} & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & q^{-2n} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & q^{-n} \end{pmatrix}$$

a to je jedinična matrica jer je $q^n = 1$ pa su svi članovi na dijagonali jednaki 1. Dakle, konačno imamo

$$\hat{u}^n = \hat{v}^n = I.$$

3.32 Moyal-ov ili \star -proizvod definisan je sa

$$f(x, p) \star g(x, p) = f(x, p) \exp\left(\frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x)\right) g(x, p).$$

Strelica iznad izvoda pokazuje na šta izvod deluje.

a) \star -komutator funkcija x i p je

$$\begin{aligned} [x, p]_\star &= x \star p - p \star x \\ &= x \exp\left(\frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x)\right) p - p \exp\left(\frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x)\right) x. \end{aligned}$$

Razmotrimo eksponencijalni operator koji se javlja u definiciji Moyal-ovog proizvoda. Njegov Taylor-ov razvoj je

$$\exp\left(\frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_x\overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p\overrightarrow{\partial}_x)\right) = 1 + \left(\frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_x\overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p\overrightarrow{\partial}_x)\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_x\overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p\overrightarrow{\partial}_x)\right)^2 + \dots$$

Pošto taj operator deluje na x i p , koji su linearne funkcije u faznom prostoru, samo će prva dva člana dati netrivialan doprinos (viši članovi sadrže više izvode, a oni deluju na linearnu funkciju tako što daju 0). Zato je

$$\begin{aligned} [x, p]_{\star} &= x\left(1 + \left(\frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_x\overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p\overrightarrow{\partial}_x)\right)\right)p - p\left(1 + \left(\frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_x\overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p\overrightarrow{\partial}_x)\right)\right)x \\ &= xp + \frac{i\hbar}{2} - \left(px - \frac{i\hbar}{2}\right) \\ &= i\hbar, \end{aligned}$$

što je trebalo dokazati. Ovde su x i p fazne koordinate, pa međusobno komutiraju, ali je kao što smo videli u ovom zadatku, njihov \star - proizvod nekomutativan.

- b)** Pošto nas interesuje rezultat do kvadratičnog člana po \hbar , dovoljno je da u razvoju eksponenta u Moyal-ovom proizvodu uzmemo samo prva dva sabirka.

$$\begin{aligned} [f, g]_{\star} &= f\left(1 + \left(\frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_x\overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p\overrightarrow{\partial}_x)\right)\right)g - g\left(1 + \left(\frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_x\overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p\overrightarrow{\partial}_x)\right)\right)f + O(\hbar^2) \\ &= fg + \frac{i\hbar}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial x}\right) - gf - \frac{i\hbar}{2}\left(\frac{\partial g}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial p} - \frac{\partial g}{\partial p}\frac{\partial f}{\partial x}\right) + O(\hbar^2) \\ &= i\hbar\{f, g\}_{\text{PZ}} + O(\hbar^2). \end{aligned}$$

- c)** Fourier transform funkcije $f(x, p)$ definisane u faznom prostoru je

$$\tilde{f}(q, y) = \frac{1}{2\pi} \int dx dp e^{-iqx} e^{ipy} f(x, p),$$

dok je inverzna Fourier-ova transformacija

$$f(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int dq dy e^{iqx} e^{-ipy} \tilde{f}(q, y).$$

Sad ćemo u izraz koji definiše Moyal-ov proizvod $f \star g$ funkcije f i g napisati preko njihovog Fourier transformata:

$$\begin{aligned} f(x, p) \star g(x, p) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dq dy dk dz e^{iqx} e^{-ipy} \tilde{f}(q, y) \\ &\quad \exp\left(\frac{i}{2}(\overleftarrow{\partial}_x\overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p\overrightarrow{\partial}_x)\right) e^{ikx} e^{-ipz} \tilde{g}(k, z). \end{aligned}$$

Pošto se koordinate x i p pojavljuju samo u faznim faktorima, izračunajmo kako eksponencijalni diferencijalni operator deluje na njih.

$$\begin{aligned} F &= e^{iqx} e^{-ipy} \exp\left(\frac{i}{2}(\overleftarrow{\partial}_x\overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p\overrightarrow{\partial}_x)\right) e^{ikx} e^{-ipz} \\ &= e^{iqx} e^{-ipy} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{2}(\overleftarrow{\partial}_x\overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p\overrightarrow{\partial}_x)\right)^n e^{ikx} e^{-ipz} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= e^{iqx} e^{-ipy} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{2} ((iq)(-iz) - (-iy)(ik)) \right)^n e^{ikx} e^{-ipz} \\
&= e^{iqx} e^{-ipy} e^{\frac{i}{2}(qz-yk)} e^{ikx} e^{-ipz}.
\end{aligned}$$

Dakle, imao da je

$$f(x, p) \star g(x, p) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int dq dy dk dz \tilde{f}(q, y) e^{iqx} e^{-ipy} e^{\frac{i}{2}(qz-yk)} e^{ikx} e^{-ipz} \tilde{g}(k, z).$$

Uradimo sledeće smene

$$q = \frac{q'}{2} + k', \quad k = \frac{q'}{2} - k', \quad y = \frac{y'}{2} + z', \quad z = \frac{y'}{2} - z'.$$

Jakobijan ove transformacije je 1, pa je $dq dy dk dz = dq' dy' dk' dz'$. Nakon smene dobijamo:

$$\begin{aligned}
f(x, p) \star g(x, p) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dq' dy' dk' dz' e^{iq'x} e^{-ipy'} \\
&\quad \tilde{f}\left(\frac{q'}{2} + k', \frac{y'}{2} + z'\right) e^{\frac{i}{2}(k'y' - q'z')} \tilde{g}\left(\frac{q'}{2} - k', \frac{y'}{2} - z'\right).
\end{aligned}$$

S druge strane, leva strana poslednje jednačine se može napisati i preko Fourier-ovog transformata

$$f \star g(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int dq' dy' e^{iq'x} e^{-ipy'} \widetilde{f \star g}(q', y'),$$

tako da prepoznamo

$$\widetilde{f \star g}(q, y) = \frac{1}{2\pi} \int dk dz \tilde{f}\left(\frac{q}{2} + k, \frac{y}{2} + z\right) e^{\frac{i}{2}(ky - qz)} \tilde{g}\left(\frac{q}{2} - k, \frac{y}{2} - z\right).$$

Ova formula može da se iskoristi i kao način definisanja Moyal-ovog proizvoda.

3.33 Neka je $\psi_0(x)$ osnovno stanje Schrödinger-ove jednačine. Neodređenost potencijalne energije do na konstantu omogućava nam da bez gubljenja opštosti izaberemo da je energija osnovnog stanja $E_0 = 0$. Onda se Schrödinger-ova jednačina za osnovno stanje svodi na

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_0''(x) + U_1(x) \psi_0(x) = 0,$$

tako da je potencijalna energija povezana sa talasnom funkcijom osnovnog stanja

$$U_1(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)}.$$

a) Sad ćemo pokazati da je moguće faktorisati hamiltonijan preko kreacionog A^\dagger i anihilacionog A operatora

$$A^\dagger = W(x) - \frac{i}{\sqrt{2m}} p = W(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx}, \quad A = W(x) + \frac{i}{\sqrt{2m}} p = W(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx},$$

tako da je

$$H_1 = A^\dagger A.$$

Pretpostavimo da je to moguće i tad imamo

$$H_1 \psi = A^\dagger A \psi$$

$$\begin{aligned}
&= \left(W(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} \right) \left(W(x)\psi(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \psi'(x) \right) \\
&= W(x)^2 \psi(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W(x) \psi'(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) \psi(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W(x) \psi'(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + \left(W(x)^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) \right) \psi(x).
\end{aligned}$$

Ovo će biti leva strana Schrödinger-ove jednačine ako je

$$U_1(x) = W(x)^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x).$$

Ovo je Riccati-jeva diferencijalna jednačina. Ako je poznata potencijalna energija, određivanje superpotencijala $W(x)$ iz gornje jednačine je jednako komplikovan problem kao i rešavanje Schrödinger-ove jednačine.

- b) Uvođenje superpotencijala je ipak korisna stvar. Prisetimo najpre da se za osnovno stanje (čija je energija $E_0 = 0$) Schrödinger-ova jednačina u faktorisanoj formi svodi na

$$\begin{aligned}
H_1 \psi_0 = 0 &\Rightarrow A^\dagger A \psi_0 = 0 \Rightarrow A \psi_0 = 0 \\
&\Rightarrow W(x) \psi_0(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \psi_0'(x) = 0 \\
&\Rightarrow W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)}.
\end{aligned}$$

Ovo je tražena veza između superpotencijala i talasne funkcije osnovnog stanja. Pošto je to diferencijalna jednačina prvog reda, ako je poznat superpotencijal može se odrediti i osnovno stanje.

Neka je

$$H_2 = AA^\dagger,$$

supersimetrični partner hamiltonijana H_1 . Oni zajedno čine supersimetrični hamiltonijan

$$H = \begin{pmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{pmatrix}.$$

Anihilacioni i kreacioni operator definišu "fermionske" operatore

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

- c) Sad ćemo odrediti komutacione i antikomutacione relacije unutar algebre koju čine operatori H , Q , i Q^\dagger .

$$[H, Q] = \begin{pmatrix} A^\dagger A & 0 \\ 0 & AA^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^\dagger A & 0 \\ 0 & AA^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ AA^\dagger A - AA^\dagger A & 0 \end{pmatrix} = 0,$$

$$[H, Q^\dagger] = \begin{pmatrix} A^\dagger A & 0 \\ 0 & AA^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^\dagger A & 0 \\ 0 & AA^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger AA^\dagger - A^\dagger AA^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 0,$$

$$\{Q, Q\} = 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix} = 0,$$

$$\{Q^\dagger, Q^\dagger\} = 2 \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 0,$$

$$\{Q, Q^\dagger\} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^\dagger A & 0 \\ 0 & AA^\dagger \end{pmatrix} = H$$

Ovakva struktura se naziva supersimetrična algebra.

- d)** Sad ćemo prodiskutovati odnos spektra hamiltonijana H_1 i njegovog supersimetričnog partnera H_2 .

$$\begin{aligned} H_2 \psi &= AA^\dagger \psi \\ &= \left(W(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} \right) \left(W(x) \psi(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \psi'(x) \right) \\ &= W(x)^2 \psi(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W(x) \psi'(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) \psi(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W(x) \psi'(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + \left(W(x)^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) \right) \psi(x). \end{aligned}$$

Dakle, H_2 je takođe hamiltonijan, sa potencijalnom energijom

$$U_2(x) = W(x)^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x).$$

Da vidimo kakav je odnos spektara operatora H_1 i H_2 . Videli smo ranije da je energija osnovnog stanja hamiltonijana H_1 : $E_0^{(1)} = 0$. Ostala stanja imaju energiju koja je pozitivna i važi da je

$$H_1 \psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} \psi_n^{(1)}.$$

Isto tako i H_2 ima svoj spektar

$$H_2 \psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} \psi_n^{(2)}.$$

Sad je vreme da povežemo ta dva spektra. Uočimo da je

$$H_1 \left(A^\dagger \psi_n^{(2)} \right) = A^\dagger AA^\dagger \psi_n^{(2)} = A^\dagger H_2 \psi_n^{(2)} = A^\dagger E_n^{(2)} \psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} \left(A^\dagger \psi_n^{(2)} \right),$$

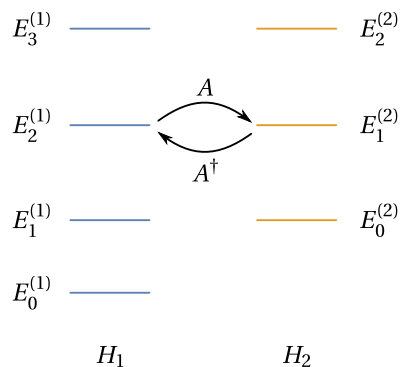
$$H_2 \left(A \psi_n^{(1)} \right) = AA^\dagger A \psi_n^{(1)} = AH_1 \psi_n^{(1)} = AE_n^{(1)} \psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} \left(A \psi_n^{(1)} \right).$$

Dakle, svojstvene vrednosti hamiltonijana H_1 su $E_n^{(2)}$ (za stanja $A^\dagger \psi_n^{(2)}$) dok su svojstvene vrednosti od H_2 su $E_n^{(1)}$ (odgovaraju im stanja $A \psi_n^{(1)}$). Zbog toga spektri su isti, s jednom razlikom. Za osnovno stanje prvog hamiltonijana važi da je $A \psi_1^{(0)} = 0$. To bi značilo da rešenje svojstvenog problema od H_2 u svom spektru nema rešenje $A \psi_1^{(0)}$ (jer je to trivijalno rešenje, talasna funkcija je nula) tako da spektar drugog hamiltonijana počinje sa prvim pobuđenim stanjem prvog hamiltonijana (slika 3.1). Iz gornjih relacija vidimo da je

$$E_0^{(1)} = 0, \quad E_n^{(2)} = E_{n+1}^{(1)}, \quad \psi_{n+1}^{(1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{E_n^{(2)}}} A^\dagger \psi_n^{(2)}(x), \quad \psi_n^{(2)}(x) = \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^{(1)}}} A \psi_{n+1}^{(1)}(x).$$

- e)** I za kraj razmotrimo supersimetrične partnere za harmonijski oscilator sopstvene frekvencije ω i beskonačno duboku potencijalnu jamu širine a . Kad je čestica mase m u potencijalu harmonijskog oscilatora taj je

$$U_1 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - \frac{1}{2} \hbar \omega.$$



Slika 3.1: Spektri od H_1 i njemu supersimetričnog partnera H_2 .

Ovde smo dodali konstantan član potencijalnoj energiji da bi energija osnovnog stanja bila $E_0 = 0$. Osnovno stanje je

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right).$$

Superpotencijal harmonijskog oscilatora je

$$W = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d \ln \psi_0}{dx} = \sqrt{\frac{m}{2}} \omega x.$$

Potencijalna energija supersimetričnog partnera je

$$U_2 = W(x)^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \frac{1}{2} \hbar \omega,$$

što je potencijalna energija harmonijskog oscilatora koji je u odnosu na H_1 pomenen za $\hbar\omega$. Vidimo da je supersimetrični partner harmonijskog oscilatora opet harmonijski oscilator. Ova osobina se naziva invarijantnost oblika potencijala. Kreacioni i anihilacioni operatori su standardni operatori o kojima će biti reči u lekciji o harmonijskog oscilatora na kraju treće glave.

Razmotrimo još i česticu između beskonačnih zidova koji su u $x = 0$ i $x = a$. Svojstvene funkcije su

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \text{ za } x \in (0, a)$$

i nula inače. Spektar je $E_n = \hbar^2 \pi^2 n^2 / (2ma^2)$. Osnovno stanje je $E_1 = \hbar^2 \pi^2 / (2ma^2)$. Da bi energija osnovnog stanja bila jednaka 0, razmotrimo potencijalnu energiju:

$$U_1 = \begin{cases} -\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, & x \in (0, a) \\ \infty, & x \notin (0, a) \end{cases}$$

Odgovarajući hamiltonijan ima osnovno stanje

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a},$$

iz čega nalazimo superpotencijal u oblasti $x \in (0, a)$

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\pi}{a} \operatorname{ctg} \frac{\pi x}{a}.$$

Supersimetrični partner ima potencijalnu energiju

$$U_2(x) = W(x)^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) = U_1(x) + \sqrt{\frac{2}{m}} \hbar W'(x) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left(\frac{2}{\sin^2 \frac{\pi x}{a}} - 1 \right).$$

Za ovu potencijalnu energiju (konstata se može odbaciti), spektar je

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n+1)^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

Kreacioni i anihilacioni operator su

$$A^\dagger = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\pi}{a} \operatorname{ctg} \frac{\pi x}{a} + \frac{d}{dx} \right), \quad A = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\pi}{a} \operatorname{ctg} \frac{\pi x}{a} - \frac{d}{dx} \right),$$

pa je npr. osnovno stanje hamiltonijana H_2

$$\psi_1^{(2)} = -\sqrt{\frac{2}{a}} \frac{1}{\sqrt{E_2^1}} \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\pi}{a} \operatorname{ctg} \frac{\pi x}{a} - \frac{d}{dx} \right) \sin \frac{2\pi x}{a} = -2\sqrt{\frac{2}{3a}} \sin^2 \frac{\pi x}{a},$$

u intervalu $(0, a)$ i 0 van njega.

3.34 Vremenski zavisna Schrödinger-ova jednačina ima oblik

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = H(t) \Psi(x, t).$$

Operator evolucije $U(t, t_0)$ prevodi stanje iz trenutka $\Psi(x, t_0)$ u stanje u trenutku $\Psi(x, t)$

$$\Psi(x, t) = U(t, t_0) \Psi(x, t_0),$$

pa je

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) \Psi(x, t_0) = H(t) U(t, t_0) \Psi(x, t_0).$$

Pošto je početno stanje proizvoljno, gornju jednakost možemo da napišemo kao jednačinu za $U(t, t_0)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0).$$

To je diferencijalna jednačina koju zadovoljava $U(t, t_0)$. Početni uslov koji zadovoljava $U(t, t_0)$ je trivijalan

$$U(t_0, t_0) = 1$$

jer je u početnom trenutku operator koji prevodi početno stanje u trenutno stanje zapravo jedinični operator.

Sad razmotrimo rešenje. Ono zaista zadovoljava početni uslov $U(t_0, t_0) = 1$ jer su svi integrali 0, pošto su gornja i donja granica jednake. Diferenciranjem rešenja iz formulacije zadatka dobijamo

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = & \frac{\partial}{\partial t} \left(1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_2) \right. \\ & \left. + \frac{1}{(i\hbar)^3} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_2) \int_{t_0}^{t_2} dt_3 H(t_3) + \dots \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{i\hbar} H(t) + \frac{1}{(i\hbar)^2} H(t) \int_{t_0}^t dt_2 H(t_2) + \frac{1}{(i\hbar)^3} H(t) \int_{t_0}^t dt_2 H(t_2) \int_{t_0}^{t_2} dt_3 H(t_3) + \dots \\
&= \frac{1}{i\hbar} H(t) \left(1 + \frac{1}{(i\hbar)} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_2) + \dots \right) \\
&= \frac{1}{i\hbar} H(t) U(t, t_0).
\end{aligned}$$

Prema tome $U(t, t_0)$ je rešenje vremenski zavisne Schrödinger-ove jednačine.

3.35 Kreacioni i anihilacioni operator zadovoljavaju komutacionu relaciju

$$[a, a^\dagger] = 1.$$

To se lako pokazuje ako krenemo od definicije ovih operatora

$$a = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega x + ip), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega x - ip).$$

Onda je

$$\begin{aligned}
[a, a^\dagger] &= \left[\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega x + ip), \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega x - ip) \right] \\
&= \frac{1}{2m\hbar\omega} \left(m^2 \omega^2 \underbrace{[x, x]}_0 - im\omega \underbrace{[x, p]}_{i\hbar} + im\omega \underbrace{[p, x]}_{-i\hbar} + \underbrace{[p, p]}_0 \right) \\
&= 1.
\end{aligned}$$

- a)** Da bismo odredili komutator $[a^n, a^\dagger]$ pogledaćemo čemu je jednak za nekoliko konkretnih vrednosti n . Tako se za $n = 1$ svodi na komutacionu relaciju anihilacionog i kreacionog operatora i tad je jednak 1. Za $n = 2$ je

$$[a^2, a^\dagger] = a [a, a^\dagger] + [a, a^\dagger] a = a + a = 2a,$$

za $n = 3$ imamo

$$[a^3, a^\dagger] = a [a^2, a^\dagger] + [a, a^\dagger] a^2 = 2a^2 + a^2 = 3a^2.$$

Na osnovu ovih nekoliko primera možemo da pretpostavimo da je

$$[a^n, a^\dagger] = na^{n-1}.$$

Dokažimo ovu formulu principo matematičke indukcije. Za $n = 1$ smo već dokazali ispravnost ove formule. Pretpostavimo da važi za n i dokažimo da je tačna za $n + 1$.

$$[a^{n+1}, a^\dagger] = a [a^n, a^\dagger] + [a, a^\dagger] a^n = ana^{n-1} + a^n = (n+1)a^n, \checkmark$$

čime je dokazana pretpostavljena formula.

- b)** Ovaj zadatak se radi na isti način kao i prethodni i dobija se

$$[a, (a^\dagger)^n] = n(a^\dagger)^{n-1}.$$

c) Za $n = 1$ je

$$[a, N] = [a, a^\dagger a] = a^\dagger [a, a] + [a, a^\dagger] a = a,$$

kad je $n = 2$ onda je

$$[a^2, N] = a[a, N] + [a, N]a = a^2 + a^2 = 2a^2.$$

Dalje, za $n = 3$ dobijamo

$$[a^3, N] = a[a^2, N] + [a, N]a^2 = 2a^3 + a^3 = 3a^3$$

pa se nameće pretpostavka

$$[a^n, N] = na^n.$$

Za $n = 1$ smo već videli da je tačna, sad proverimo da iz $n \Rightarrow n + 1$.

$$[a^{n+1}, N] = a[a^n, N] + [a, N]a^n = ana^n + a^{n+1} = (n+1)a^{n+1}. \checkmark$$

Poslednju jednakost smo mogli da pokažemo i koristeći rezultat pod **b**). Naime,

$$[a^{n+1}, N] = [a^{n+1}, a^\dagger a] = a^\dagger \underbrace{[a^{n+1}, a]}_0 + \underbrace{[a^{n+1}, a^\dagger]}_{(n+1)a^n} a = (n+1)a^{n+1}.$$

3.36 Očekivane vrednosti $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ mogu se odrediti u koordinatnoj (ili impulsnoj reprezentaciji) i tad se svode na integrale Hermite-ovih polinoma. Sad ćemo videti da se pomoću operatore kreacije i anihilacije ovi izrazi mnogo lakše računaju. Videli smo da su a i a^\dagger

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega\hat{x} + i\hat{p}), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega\hat{x} - i\hat{p}).$$

Invertujemo ove relacije, odnosno napišimo \hat{x} i \hat{p} preko \hat{a} i \hat{a}^\dagger :

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}).$$

Sad imamo da su

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \langle n | x | n \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | \hat{a}^\dagger + \hat{a} | n \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\langle n | \underbrace{\hat{a}^\dagger | n \rangle}_{\sqrt{n+1}|n+1\rangle} + \langle n | \underbrace{\hat{a} | n \rangle}_{\sqrt{n}|n-1\rangle} \right) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Vidimo da je ovaj rezultat 0. Pošto su bra i ket isto stanje n , a vidimo da \hat{a}^\dagger podiže ket stanje za jedan, dok ga \hat{a} smanjuje za jedan, nenulti doprinos će davati kombinacije kreacionih i anihilacionih operatora koji prevedu n u n , a to su proizvodi koji sadrže isti broj kreacionih i anihilacionih operatora. Pošto su koordinata i impuls linearni po kreacionih i anihilacionim operatorima, onda će doprinos imati samo parni stepeni od \hat{x} i \hat{p} . Odredimo $\langle x^2 \rangle$.

$$\langle x^2 \rangle = \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 | n \rangle \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger | n \rangle + \langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle + \langle n | \hat{a} \hat{a}^\dagger | n \rangle + \langle n | \hat{a} \hat{a} | n \rangle \right) \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1).
\end{aligned}$$

Ovde je na samom kraju uočeno da je $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$. Pošto je $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ onda je $\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle = n$. Slično, vidimo da je

$$\hat{a} \hat{a}^\dagger = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger \hat{a} = 1 + \hat{N},$$

pa je $\langle n | \hat{a} \hat{a}^\dagger | n \rangle = \langle n | \hat{N} + 1 | n \rangle = n + 1$.

Očekivane vrednosti $\langle p \rangle$ i $\langle p^2 \rangle$, poučeni prethodnim iskustvima, možemo da izračunamo malo brže. Odmah vidimo da je

$$\langle p \rangle = \langle n | p | n \rangle = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \langle n | (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) | n \rangle = 0,$$

dok je

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle \\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle n | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2 | n \rangle \\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2} \left(-\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle - \langle n | \hat{a} \hat{a}^\dagger | n \rangle \right) \\
&= \frac{m\hbar\omega}{2} (2n+1).
\end{aligned}$$

Disperzije su

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1)}, \quad \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2} (2n+1)},$$

pa je

$$\Delta x \Delta p = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Ovaj izraz je u skladu sa relacijama neodređenosti između koordinate i impulsa, a najmanji je kad je $n = 0$, odnosno kad je sistem u osnovnom stanju.

3.37 Osnovno stanje harmonijskog oscilatora zadovoljava

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \Rightarrow \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0.$$

Ova diferencijalna jednačina razdvaja promenljive

$$\frac{d\psi_0(x)}{\psi_0(x)} = -\frac{m\omega}{\hbar} x dx \Rightarrow \ln \psi_0(x) = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \ln C \Rightarrow \psi_0(x) = C e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}.$$

Konstantu C određujemo iz uslova da je talasna funkcija normirana

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow C^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} = 1 \Rightarrow C^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1 \Rightarrow C = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4},$$

pa je osnovno stanje

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Kreacioni operator podiže broj stanja za jedan. Dakle, n to stanje dobijamo tako što \hat{a}^\dagger deluje n puta na osnovno stanje $|0\rangle$:

$$|n\rangle = C_n(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle.$$

Ovde je C_n konstanta normiranja. Primitimo da je $|n-1\rangle = C_{n-1}(\hat{a}^\dagger)^{n-1}|0\rangle$ pa onda imamo

$$|n\rangle = C_n \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^{n-1} |0\rangle = \frac{C_n}{C_{n-1}} \hat{a}^\dagger |n-1\rangle = \frac{C_n}{C_{n-1}} \sqrt{n} |n\rangle \Rightarrow \frac{C_n}{C_{n-1}} \sqrt{n} = 1 \Rightarrow C_n = \frac{C_{n-1}}{\sqrt{n}}.$$

Pošto je $C_1 = 1$, zaključujemo da je $C_n = 1/\sqrt{n!}$, pa je

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle.$$

Napisana u koordinatnoj reprezentaciji, ova jednačina postaje

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{(2m\hbar\omega)^{n/2}} \left(m\omega x - \hbar \frac{d}{dx}\right)^n \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

ili nakon neznatnog sređivanja

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Ovde prepoznavamo (formule iz zadatka 2.3) Hermite-ove polinome

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} = H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},$$

pa dobijamo rezultat iz zadatka 2.2

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

3.38 U reprezentaciji svojstvenih stanja energije bazis je $\beta = \{|n\rangle, n \in \mathbb{N}_0\}$. Bazične elemente reprezentujemo apsolutnim bazisom

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \dots$$

Operatori koordinate i impulsa su matrice beskonačne dimenzije, a njih dobijamo iz relacija u kojima su koordinata i impuls napisani preko anihilacionog i kreacionog operatora

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}).$$

- a) Pogledajmo kako izgledaju ove matrice. Odredimo kako \hat{x} deuje na prvih nekoliko bazisnih vektora:

$$\begin{aligned}\hat{x}|0\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}|1\rangle, \\ \hat{x}|1\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})|1\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{2}|2\rangle + |0\rangle), \\ \hat{x}|2\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})|2\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{3}|3\rangle + \sqrt{2}|1\rangle).\end{aligned}$$

Iz ovih jednačina prepoznajemo pravila koja određuju kako izgleda matrica $[x]$

$$[x] = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \ddots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \ddots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Ponavljajući postupak u slučaju operatora impulsa, dobijamo da je odgovarajuća matrica

$$[p] = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & \dots \\ i & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \ddots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \ddots \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Kad ostavimo samo prvih n vrsta i kolona, dobijamo konačne matrice. Odsečena matrica koordinate je

$$[x_n] = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \sqrt{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{n-1} & 0 \end{pmatrix}.$$

- b) Vidimo da su nenulti elementi matrice $[x_n]$ neposredno ispod i iznad glavne dijagonale. Zanemarujući faktor ispred matrice, u *Mathematica*TM ova matrica se zadaje sa

```
x[i_, j_] := Sqrt[(i + j + 1)/2] /; Abs[i - j] == 1
x[i_, j_] := 0 /; Abs[i - j] != 1
x[dimenzija_] :=
  Table[x[i, j], {i, 0, dimenzija - 1}, {j, 0, dimenzija - 1}]
```

Sad je moguće dobiti matricu bilo koje dimenzije, npr. matrica koordinate dimenzije 9 dobija se sa

x[9]

Sad ćemo videti šta se dešava sa svojstvenim vrednostima kako raste dimenzija matrice. Za $n = 5$ svojstvene vrednosti se dobijaju pomoću

Sort [N[Eigenvalues [x[5]]]]

i rezultati su:

{-2.85697, -1.35563, 0., 1.35563, 2.85697}

Imamo pet svojstvenih vrednosti i rastojanje između dve svojstvene vrednosti je oko 1.4. Za $n = 25$ dobijamo da je skup svojstvenih vrednosti

{-8.7176, -7.65604, -6.76746, -5.96601, -5.21885, -4.50893, -3.8259, -3.16278, -2.51447, -1.87706, -1.24731, -0.622462, 0., 0.622462, 1.24731, 1.87706, 2.51447, 3.16278, 3.8259, 4.50893, 5.21885, 5.96601, 6.76746, 7.65604, 8.7176}

Sad su svojstvene vrednosti više nego duplo gušće. Ovim vidimo šta je trend sa povećanjem matrice, dobijamo sve veći interval svojstvenih vrednosti pri čemu se rastojanje između njih smanjuje.

3.39 Relacije koje određuju kako anihilacioni i kreacioni operator deluju na svojstveno stanje hamiltonijana $|n\rangle$ su

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle.$$

Zadatak je da napišemo ove relacije u koordinatnoj reprezentaciji i vidimo da se one svode na rekurentne relacije između Hermité-ovih polinoma. Najpre prva relacija. Nakon skraćivanja

$$\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \left(m\omega x - \hbar \frac{d}{dx} \right) \frac{1}{\sqrt{n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} = \sqrt{n+1} \frac{1}{\sqrt{2(n+1)!}} H_{n+1} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2},$$

ili nakon uvođenja bezdimenzionog parametra $\xi = x\sqrt{m\omega/\hbar}$

$$\left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} = H_{n+1}(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

ili nakon diferenciranja i skraćivanja sa $e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ i korišćenjem identite $H'_n = 2nH_{n-1}$ dobijamo

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

a to je rekurentna relacija između Hermite-ovih polinoma (dokazana u zadatku 2.4).

Iz druge relacije se na sličan način dobija najpre

$$\left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 2nH_{n-1}(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

a onda iz toga sledi rekurentna relacija

$$H'_n = 2nH_{n-1}.$$

3.40 Označićemo sa \hat{a}^\dagger i \hat{a} kreacioni i anihilacioni operator u Schrödinger-ovoj slici. Ove operatore u Heisenberg-ovoj slici možemo da odredimo na osnovu jednačina koje određuju evoluciju ovih operatora:

$$i\hbar \frac{d\hat{a}^\dagger(t)}{dt} = [\hat{a}^\dagger(t), \hat{H}(t)], \quad i\hbar \frac{d\hat{a}(t)}{dt} = [\hat{a}(t), \hat{H}(t)].$$

Ovde je $\hat{H}(t)$ hamiltonijan u Heisenberg-ovoj slici

$$\hat{H}(t) = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(t) + \frac{1}{2} \right).$$

Diferencijalna jednačina za kreacioni operator je

$$i\hbar \frac{d\hat{a}^\dagger(t)}{dt} = -\hbar\omega \hat{a}^\dagger(t),$$

jer je

$$[\hat{a}^\dagger(t), \hat{H}(t)] = \left[\hat{a}^\dagger(t), \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(t) + \frac{1}{2} \right) \right] = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger(t) [\hat{a}^\dagger(t), \hat{a}(t)] \right) = -\hbar\omega \hat{a}^\dagger(t)$$

Dakle, diferencijalna jednačina ima rešenje

$$\frac{d\hat{a}^\dagger(t)}{dt} = i\omega \hat{a}^\dagger(t) \Rightarrow \hat{a}^\dagger(t) = \hat{a}^\dagger(0)e^{i\omega t} = \hat{a}^\dagger e^{i\omega t},$$

jer se u početnom trenutku operatori u Schrödinger-ovoj i Heisenberg-ovoj slici podudaraju $\hat{a}^\dagger(0) = \hat{a}^\dagger$. Na isti način dobija se da je anihilacioni operator u Heisenberg-ovoj slici

$$\hat{a}(t) = \hat{a} e^{-i\omega t}.$$

Obratimo pažnju da se hamiltonijan ne menja u toku vremena. Naime, dobijeni izrazi za $\hat{a}^\dagger(t)$ i $\hat{a}(t)$ ukazuju da je

$$\hat{H}(t) = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(t) + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger e^{i\omega t} \hat{a} e^{-i\omega t} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hat{H}.$$

Operator koordinate i impulsa u Heisenberg-ovoj slici dobijamo iz veza sa kreacionim i anihilacionim operatorima. Tako je

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\hat{a}^\dagger(t) + \hat{a}(t) \right) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\hat{a}^\dagger e^{i\omega t} + \hat{a} e^{-i\omega t} \right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left((\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \cos \omega t + i(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \sin \omega t \right) \\ &= \hat{x} \cos \omega t + \frac{1}{m\omega} \hat{p} \sin \omega t. \end{aligned}$$

gde su \hat{x} i \hat{p} operatori koordinate i impulsa u Schrödinger-ovoj slici. Polazeći od

$$\hat{p}(t) = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(\hat{a}^\dagger(t) - \hat{a}(t) \right),$$

na istovetan način kao što je dobijen operator koordinate dobija se da je operator impulsa harmonijskog oscilatora u Heisenberg-ovoj slici

$$\hat{p}(t) = \hat{p} \cos \omega t - \hat{x} m\omega \sin \omega t.$$

Preostalo je još da se odrede komutatori:

$$\begin{aligned}
 [\hat{x}(t_1), \hat{x}(t_2)] &= \left[\hat{x} \cos \omega t_1 + \frac{1}{m\omega} \hat{p} \sin \omega t_1, \hat{x} \cos \omega t_2 + \frac{1}{m\omega} \hat{p} \sin \omega t_2 \right] \\
 &= \frac{1}{m\omega} \cos \omega t_1 \sin \omega t_2 (i\hbar) + \frac{1}{m\omega} \sin \omega t_1 \cos \omega t_2 (-i\hbar) \\
 &= \frac{i\hbar}{m\omega} \sin \omega (t_2 - t_1) \\
 [\hat{x}(t_1), \hat{p}(t_2)] &= \left[\hat{x} \cos \omega t_1 + \frac{1}{m\omega} \hat{p} \sin \omega t_1, \hat{p} \cos \omega t_2 - m\omega \hat{x} \sin \omega t_2 \right] \\
 &= \cos \omega t_1 \cos \omega t_2 (i\hbar) - \sin \omega t_1 \sin \omega t_2 (-i\hbar) \\
 &= i\hbar \cos \omega (t_2 - t_1).
 \end{aligned}$$

3.41 Da bismo izračunali $e^{-\alpha \hat{a}^\dagger} a e^{\alpha \hat{a}^\dagger}$ iskoristićemo Baker–Campbell–Hausdorff-ovu formulu (zadatak 3.29)

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots$$

i komutacionu relaciju anihilacionog i kreacionog operatora

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1.$$

Ako uzmemo da je

$$A = -\alpha \hat{a}^\dagger, \quad B = \hat{a},$$

Baker–Campbell–Hausdorff-ova formula nam daje

$$e^{-\alpha \hat{a}^\dagger} \hat{a} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} = \hat{a} - \alpha \underbrace{[\hat{a}^\dagger, \hat{a}]_{-1}} + \frac{\alpha^2}{2!} \underbrace{[\hat{a}^\dagger, [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]]_0}_{-1} + \dots$$

Dakle, vidimo da se Baker–Campbell–Hausdorff-ova formula svodi na samo dva sabirka

$$e^{-\alpha \hat{a}^\dagger} \hat{a} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} = \alpha + \hat{a}.$$

Pomnožio sleva ovu jednačinu sa $e^{\alpha \hat{a}^\dagger}$ i dobićemo

$$\hat{a} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} = \alpha e^{\alpha \hat{a}^\dagger} + e^{\alpha \hat{a}^\dagger} \hat{a}.$$

Pošto je $|\alpha\rangle = e^{\alpha \hat{a}^\dagger} |0\rangle$ koherentno stanje onda je ono svojstveni vektor anihilacionog operatora sa svojstvenom vrednošću α

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle.$$

Sad ćemo to da proverimo

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \hat{a} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} |0\rangle = \left(\alpha e^{\alpha \hat{a}^\dagger} + e^{\alpha \hat{a}^\dagger} \hat{a} \right) |0\rangle = \alpha e^{\alpha \hat{a}^\dagger} |0\rangle = \alpha |\alpha\rangle.$$

Ovde je iskorišćeno da je $\hat{a} |0\rangle = 0$. Obratimo pažnju da \hat{a} nije hermitski operator, pa mu nije svojstvena vrednost nije realna $\alpha \in \mathbb{C}$.

3.42 Koherentno stanje $|z\rangle$ je definisano kao

$$|z\rangle = e^{z \hat{a}^\dagger} |0\rangle.$$

a) U bazisu svojstvenih stanja hamiltonijana harmonijskog oscilatora koherentno stanje je

$$|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle.$$

Onda jednačina $\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle$ postaje

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n \underbrace{\hat{a}|n\rangle}_{\sqrt{n}|n-1\rangle} = z \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle.$$

Suma sa leve strane zapravo ide od $n = 1$ (jer je $n = 0$ sabirak jednak nula) pa možemo da pomerimo sumaciju $n \rightarrow n + 1$ i dobijamo

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} z c_n |n\rangle$$

iz čega sledi rekurentna veza

$$c_{n+1} \sqrt{n+1} = z c_n.$$

Niz koji zadovoljava gornju relaciju je

$$c_n = \frac{z^n}{\sqrt{n!}} c_0.$$

Konstantu c_0 odredićemo iz uslova da je $\langle z|z\rangle = 1$. To nam daje

$$\langle z|z\rangle = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(z^*)^n}{\sqrt{n!}} \frac{z^k}{\sqrt{k!}} \underbrace{\langle n|k\rangle}_{\delta_{nk}} = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(|z|^2)^n}{n!} = |c_0|^2 e^{|z|^2} = 1 \Rightarrow c_0 = e^{-|z|^2/2}.$$

Ovim smo pokazali da je

$$|z\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$

b) Da bismo odredili skalarni proizvod $\langle z_1|z_2\rangle$ iskoristićemo formu koherentnog stanja koju smo našli u prethodnom delu zadatka:

$$\begin{aligned} \langle z_1|z_2\rangle &= e^{-|z_1|^2/2} e^{-|z_2|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(z_1^*)^n}{\sqrt{n!}} \frac{z_2^k}{\sqrt{k!}} \langle n|k\rangle \\ &= e^{-|z_1|^2/2} e^{-|z_2|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z_1^* z_2)^n}{n!} \\ &= \exp\left(-\frac{|z_1|^2 + |z_2|^2 - 2z_1^* z_2}{2}\right) \end{aligned}$$

c) Za koherentno stanje važi $\langle z|\hat{a}^\dagger = z^* \langle z|$ pa je

$$\langle \hat{x} \rangle_{|z\rangle} = \langle z|\hat{x}|z\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle z|(\hat{a}^\dagger + \hat{a})|z\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (z^* + z) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \text{Re}(z),$$

odnosno

$$\langle \hat{p} \rangle_{|z\rangle} = \langle z|\hat{p}|z\rangle = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \langle z|(\hat{a}^\dagger - \hat{a})|z\rangle = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (z^* - z) = \sqrt{2\hbar m\omega} \text{Im}(z).$$

- d) Očekivane vrednosti koordinate i impulsa našli smo u prethodnom delu zadatka. Sad još treba odrediti očekivane vrednosti kvadrata koordinate i impulsa.

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{x}^2 \rangle_{|z\rangle} &= \langle z | \hat{x}^2 | z \rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle z | (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 | z \rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle z | \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \underbrace{\hat{a} \hat{a}^\dagger}_{\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1} + \hat{a} \hat{a} | z \rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} ((z^*)^2 + z^* z + z^* z + 1 + z z)
 \end{aligned}$$

pa je

$$(\Delta x)^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle_{|z\rangle} - \langle \hat{x} \rangle_{|z\rangle}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} ((z^*)^2 + z^* z + z^* z + 1 + z z - (z^* + z)^2) = \frac{\hbar}{2m\omega}.$$

Kvadrat očekivane vrednosti impulsa i odgovarajuća disperzija se računaju na isti način i dobija se

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{p}^2 \rangle_{|z\rangle} &= -\frac{\hbar m\omega}{2} ((z^*)^2 - z^* z - z^* z - 1 + z z), \\
 (\Delta p)^2 &= \frac{\hbar m\omega}{2} (-(z^*)^2 + z^* z + z^* z + 1 - z z + (z^* - z)^2) = \frac{\hbar m\omega}{2}.
 \end{aligned}$$

Dakle, proizvod disperzije koordinate i impulsa je

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} = \frac{\hbar}{2},$$

a to je najmanja moguća vrednost, kao što tvrde relacije neodređenosti.

3.43 Ako znamo da je sistem u početnom trenutku $t = 0$ u koherentnom stanju $|\alpha\rangle$ to nam omogućava da nađemo njegovu dalju evoluciju

$$|\alpha, t\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle.$$

Konstante c_n smo odredili u zadatku **3.42 a**) i dobili smo da je $c_n = \exp(-|\alpha|^2/2) \alpha^n / \sqrt{n!}$, pa je

$$\begin{aligned}
 |\alpha, t\rangle &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{i}{\hbar} \hbar \omega (n + \frac{1}{2}) t} |n\rangle \\
 &= e^{-i\omega t/2} e^{-|\alpha|^2/2} \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} (\alpha e^{-i\omega t})^n}_{|\alpha e^{-i\omega t}\rangle} \\
 &= e^{-i\omega t/2} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle.
 \end{aligned}$$

Ovo pokazuje da vremenom koherentno stanje i dalje ostaje koherentno stanje (uz pojavu neopservabilnog faznog faktora) pri čemu parametar zavisi od vremena $\alpha \exp(-i\omega t)$. U kompleksnoj ravni, stanje je u početnom trenutku reprezentovano kompleksnim brojem α , a kasnije taj kompleksan broj rotira sopstvenom frekvencijom harmonijskog oscilatora ω u smeru kazaljke na satu.

U prethodnom zadatku smo videli i da su očekivana vrednost koordinate i impulsa proporcionalni sa realnim odnosno imaginarnim delom kompleksnog broja koje određuje koherentno stanje. Pošto je evolucijom sistem i dalje u koherentnom stanju, onda možemo da iskoristimo taj rezultat i dobijamo

$$\langle \hat{x} \rangle_{|\alpha, t\rangle} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\alpha e^{-i\omega t}), \quad \langle \hat{p} \rangle_{|\alpha, t\rangle} = \sqrt{2\hbar m\omega} \operatorname{Im}(\alpha e^{-i\omega t}).$$

Očekivana vrednost koordinate i impulsa harmonijski osciluju s ugaonom frekvencijom ω .

TRODIMENZIONNI SISTEMI

4.1 U tri dimenzije koordinate i impulsi zadovoljavaju sledeće komutacione relacije

$$[x, p_x] = i\hbar, \quad [y, p_y] = i\hbar, \quad [z, p_z] = i\hbar.$$

Svi ostali komutatori su jednaki 0 (različite komponente koordinata i impulsa komutiraju). To možemo da zapišemo i u obliku

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}.$$

Ovde je $x_1 = x$, $x_2 = y$ i $x_3 = z$ i slično za komponente impulsa. Koristeći ove komutatore, odredimo komutator dve komponente momenta impulsa npr. $[L_x, L_y]$

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z] \end{aligned}$$

Drugi i treći komutator su jednaki nuli, jer se u njima pojavljuju operatori koji međusobno komutiraju. Odredimo prvi komutator

$$[yp_z, zp_x] = y\underbrace{[p_z, zp_x]}_0 + \underbrace{[y, zp_x]}_{-i\hbar} p_z = y\underbrace{[p_z, z]}_{-i\hbar} p_x + yz\underbrace{[p_z, p_x]}_0 = -i\hbar yp_x.$$

Isti postupak primenjen na četvrti komutator daje $[zp_y, xp_z] = i\hbar xp_y$, pa je konačno

$$[L_x, L_y] = -i\hbar yp_x + i\hbar xp_y = i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar L_z.$$

4.2 Komponente vektora \vec{L} međusobno ne komutiraju, pa taj vektor ima neke osobine koje su neočekivane za sve koji su svoju intuiciju razvili na vektorima čije su komponente obični brojevi. Jedna od njih je da vektorski proizvod \vec{L} sa samim sobom nije nula (kao kod običnih vektora), već je srazmeran sa \vec{L} . To se lako pokazuje:

$$\begin{aligned} \vec{L} \times \vec{L} &= \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ L_x & L_y & L_z \\ L_x & L_y & L_z \end{vmatrix} \\ &= \vec{e}_x \underbrace{(L_y L_z - L_z L_y)}_{[L_y, L_z] = i\hbar L_x} + \vec{e}_y \underbrace{(L_z L_x - L_x L_z)}_{[L_z, L_x] = i\hbar L_y} + \vec{e}_z \underbrace{(L_x L_y - L_y L_x)}_{[L_x, L_y] = i\hbar L_z} \\ &= i\hbar(L_x \vec{e}_x + L_y \vec{e}_y + L_z \vec{e}_z) = i\hbar \vec{L}. \end{aligned}$$

4.3 Komponente momenta impulsa možemo da napišemo preko simbola Levi-Civita (ili epsilon simbola) $L_i = \varepsilon_{ijk} x_j p_k$. Ovdje koristimo Einstein-ovu sumacionu konvenciju da se ne piše znak sumiranja i da se podrazumeva sumiranje po ponovljenim indeksima. Onda je

$$L^2 = L_i L_i = \varepsilon_{ijk} x_j p_k \varepsilon_{ilm} x_l p_m$$

Proizvod dva epsilon simbola može se napisati preko determinante Kronecker-ovih delti

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmn} = \begin{vmatrix} \delta_{il} & \delta_{im} & \delta_{in} \\ \delta_{jl} & \delta_{jm} & \delta_{jn} \\ \delta_{kl} & \delta_{km} & \delta_{kn} \end{vmatrix},$$

iz čega slede identiteti sa sumacijama ako se ponavljaju jedan, dva ili dva tri indeksa

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{imn} = (\delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km}), \quad \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijn} = 2\delta_{kn}, \quad \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijk} = 6.$$

U izrazu za L^2 imamo sumaciju po jednom indeksu u epsilon simbolima, pa je

$$\begin{aligned} L^2 &= \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} x_j p_k x_l p_m \\ &= (\delta_{jl} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{kl}) x_j p_k x_l p_m \\ &= \delta_{jl} \delta_{kn} x_j p_k x_l p_m - \delta_{jn} \delta_{kl} x_j p_k x_l p_m. \end{aligned}$$

Ovaj izraz dalje transformišemo tako što menjamo mesta operatora u skladu sa komutacionim relacijama. Cilj nam je da se jedan do drugog pojave indeksi koji su u Kronecker-ovoj delti. Tako je prvi sabirak

$$I = \delta_{jl} \delta_{kn} x_j \underbrace{p_k x_l}_{[p_k, x_l] + x_l p_k} p_m = -i\hbar x_j p_j + \delta_{jl} \delta_{kn} x_j x_l p_k p_m = -i\hbar(\vec{r} \cdot \vec{p}) + \vec{r}^2 \vec{p}^2,$$

dok je drugi

$$\begin{aligned} II &= -\delta_{jn} \delta_{kl} x_j p_k \underbrace{x_l p_m}_{i\hbar \delta_{lm} + p_m x_l} \\ &= -i\hbar x_j p_j - \delta_{jn} \delta_{kl} x_j p_m \underbrace{p_k x_l}_{-i\hbar \delta_{kl} + x_l p_k} \\ &= -i\hbar(\vec{r} \cdot \vec{p}) + 3i\hbar(\vec{r} \cdot \vec{p}) - (\vec{r} \cdot \vec{p})(\vec{r} \cdot \vec{p}) \end{aligned}$$

pa je konačno

$$L^2 = \vec{L}^2 = \vec{r}^2 \vec{p}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})(\vec{r} \cdot \vec{p}) + i\hbar(\vec{r} \cdot \vec{p}).$$

4.4 Koristeći osnovne komutacione relacije $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$ kao i da koordinate i impulsi međusobno komutiraju, imamo

$$[L_i, x_j] = [\varepsilon_{ikl} x_k p_l, x_j] = \varepsilon_{ikl} x_k \underbrace{[p_l, x_j]}_{-i\hbar \delta_{lj}} = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k.$$

Slično je i

$$[L_i, p_j] = [\varepsilon_{ikl} x_k p_l, p_j] = \varepsilon_{ikl} \underbrace{[x_k, p_j]}_{i\hbar \delta_{kj}} p_l = i\hbar \varepsilon_{ijl} p_l.$$

Vidimo da su komutatori koordinate i impulsa sa momentom impulsa formalno slični. To je zato što su x_i i p_i vektorski operatori, a ovakva komutaciona relacija je opšta osobina vektorskih operatora.

4.5 Koristeći osnovne osobine komutatora imamo

$$[L_x^2, y] = L_x[L_x, y] + [L_x, y]L_x.$$

Pošto je

$$[L_x, y] = i\hbar\varepsilon_{12k}x_k = i\hbar\varepsilon_{123}x_3 = i\hbar z,$$

imamo da je

$$[L_x^2, y] = i\hbar(L_x z + zL_x).$$

4.6 Komponente momenta impulsa zadovoljavaju komutacione relacije

$$[L_i, L_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k.$$

- a) Komutator $[L^2, L_i]$ možemo izračunati na dva načina. Možemo da uzmemo konkretan izbor npr $i = 1$, pa imamo

$$\begin{aligned} [L^2, L_x] &= [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_x] = \underbrace{[L_x^2, L_x]}_0 + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \\ &= L_y \underbrace{[L_y, L_x]}_{-i\hbar L_z} + \underbrace{[L_y, L_x]}_{-i\hbar L_z} L_y + L_z \underbrace{[L_z, L_x]}_{i\hbar L_y} + \underbrace{[L_z, L_x]}_{i\hbar L_y} L_z \\ &= -i\hbar L_y L_z - i\hbar L_z L_y + i\hbar L_z L_y + i\hbar L_y L_z = 0. \end{aligned}$$

Ako zamenimo $x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$ gornja relacija se svodi na $[L^2, L_y] = 0$. Ova osobine se naziva cikličnost i pomoću nje možmo da dobijemo i preostalu relaciju $[L^2, L_z] = 0$. Prethodna relacija može da se dokaže na još jedan način:

$$\begin{aligned} [L^2, L_j] &= [L_i L_i, L_j] = L_i [L_i, L_j] + [L_i, L_j] L_i \\ &= i\varepsilon_{ijk} L_i L_k + i\varepsilon_{ijk} L_k L_i = i\varepsilon_{ijk} (L_i L_k + L_k L_i) \\ &= 0, \end{aligned}$$

jer je izraz u zagradi simetričan na zamenu $i \leftrightarrow k$ a ε_{ijk} je antisimetričan na takvu zamenu. Naime, suma proizvoda simetričnog $S_{ik} = S_{ki}$ i antisimetričnog $A_{ik} = -A_{ki}$ tenzora je nula. To se lako dokazuje

$$\underbrace{S_{ik} A_{ik}}_{i \leftrightarrow k} = \underbrace{S_{ki} A_{ki}}_{S_{ik} - A_{ik}} = -S_{ik} A_{ik} \Rightarrow S_{ik} A_{ik} = 0.$$

- b) Polazeći od definicije operatora $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$ imamo

$$[L_z, L_{\pm}] = [L_z, L_x \pm iL_y] = \underbrace{[L_z, L_x]}_{i\hbar L_y} \pm i \underbrace{[L_z, L_y]}_{-i\hbar L_x} = \pm \hbar (L_x \pm iL_y) = \pm \hbar L_{\pm}.$$

Drugi komutator dobijamo iz

$$[L_+, L_-] = [L_x + iL_y, L_x - iL_y] = -i \underbrace{[L_x, L_y]}_{i\hbar L_z} + i \underbrace{[L_y, L_x]}_{-i\hbar L_z} = 2\hbar L_z$$

- c) Najpre izračunajmo

$$L_- L_+ = (L_x - iL_y)(L_x + iL_y) = L_x^2 + iL_x L_y - iL_y L_x + L_y^2 = L_x^2 + L_y^2 + i \underbrace{[L_x, L_y]}_{i\hbar L_z} = L_x^2 + L_y^2 - \hbar L_z,$$

pa je

$$L^2 = \underbrace{L_x^2 + L_y^2}_{L_+L_- + \hbar L_z} + L_z^2 = L_+L_- + L_z^2 + \hbar L_z.$$

Ako krenemo od L_+L_- sličnim postupkom se može dobiti i da je

$$L^2 = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z.$$

4.7 Komponente vektorskih operatora su operatori. Pošto operatori u opštem slučaju ne komutiraju, onda se formule za skalarni i vektorski proizvod vektorskih operatora razlikuju od onih koje važe za obične vektore, čije komponente komutiraju. To smo videli na konkretnom primeru u zadatku 4.2. Skalarni i vektorski proizvod vektorskih operatora su

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = A_i B_i, \quad (\vec{A} \times \vec{B})_i = \varepsilon_{ijk} A_j B_k.$$

a) Skalarni proizvod vektorskih operatora nije komutativan

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = A_i B_i = [A_i, B_i] + B_i A_i = \vec{B} \cdot \vec{A} + [A_i, B_i].$$

Važno je naglasiti da se u poslednjem komutatoru indeks i ponavlja, pa se po njemu podrazumeva sumiranje.

b) Vektorski proizvod vektorskih operatora nije antikomutativan jer je

$$\begin{aligned} (\vec{A} \times \vec{B})_i &= \varepsilon_{ijk} A_j B_k = \varepsilon_{ijk} ([A_j, B_k] + B_k A_j) = -\varepsilon_{ikj} B_k A_j + \varepsilon_{ijk} [A_j, B_k] \\ &= -(\vec{B} \times \vec{A})_i + \varepsilon_{ijk} [A_j, B_k]. \end{aligned}$$

c) Za mešoviti proizvod tri vektorska operatora pravilo je isto kao kod običnih vektora

$$\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = A_i \varepsilon_{ijk} B_j C_k = \varepsilon_{ijk} A_i B_j C_k = (\vec{A} \times \vec{B})_k C_k = (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{C}.$$

d) Dvostruki vektorski proizvod se može napisati preko skalarnog proizvoda

$$\begin{aligned} (\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}))_i &= \varepsilon_{ijk} A_j (\vec{B} \times \vec{C})_k = \varepsilon_{ijk} A_j \varepsilon_{klm} B_l C_m \\ &= (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{jl} \delta_{im}) A_j B_l C_m \\ &= \delta_{jm} A_j B_l C_m - A_j B_j C_i \\ &= \delta_{jm} ([A_j, B_i] + B_i A_j) C_m - A_j B_j C_i \\ &= B_i (\vec{A} \cdot \vec{C}) - (\vec{A} \cdot \vec{B}) C_i + [A_j, B_i] C_j. \end{aligned}$$

4.8 Pošto kvadrat momenta impulsa komutira sa komponentama momenta impulsa, onda komutira i sa L_{\pm} koji su linearne kombinacije L_x i L_y . Zato je

$$L^2 L_{\pm} A = L_{\pm} \underbrace{L^2 A}_{\alpha A} = \alpha L_{\pm} A,$$

što je prva jednakost koju je trebalo dokazati. Drugu dokazujemo polazeći od

$$L_z L_{\pm} = [L_z, L_{\pm}] + L_{\pm} L_z = \pm \hbar L_{\pm} + L_{\pm} L_z,$$

pa je

$$L_z L_{\pm} A = (\pm \hbar L_{\pm} + L_{\pm} L_z) A = (\beta \pm \hbar) L_{\pm} A.$$

4.9 Potražimo j -tu komponentu operatorske jednačine $[L^2, \vec{A}]$.

$$\begin{aligned}
 [L^2, A_j] &= [L_i L_i, A_j] = L_i [L_i, A_j] + [L_i, A_j] L_i \\
 &= i\hbar \varepsilon_{ijk} L_i A_k + i\hbar \varepsilon_{ijk} A_k L_i \\
 &= i\hbar \varepsilon_{ijk} ([L_i, A_k] + A_k L_i) + i\hbar \varepsilon_{kij} A_k L_i \\
 &= -\hbar^2 \underbrace{\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ikl}}_{-2\delta_{jl}} A_l + \underbrace{i\hbar \varepsilon_{kij} A_k L_i + i\hbar \varepsilon_{kij} A_k L_i}_{2i\hbar(\vec{A} \times \vec{L})_j} \\
 &= 2\hbar^2 A_j + 2i\hbar(\vec{A} \times \vec{L})_j,
 \end{aligned}$$

što u vektorskoj formi možemo prepisati na sledeći način

$$[L^2, \vec{A}] = 2i\hbar(\vec{A} \times \vec{L} - i\hbar\vec{A}).$$

4.10 Poznato je da su \vec{A} i \vec{B} vektorski operatori koji komutiraju između sebe kao i sa momentom impulsa

$$[A_i, B_j] = 0, \quad [A_i, L_j] = 0, \quad [B_i, L_j] = 0.$$

Pod ovim pretpostavkama, traženi komutator je jednak

$$[\vec{A} \cdot \vec{L}, \vec{B} \cdot \vec{L}] = [A_i L_i, B_j L_j] = A_i B_j [L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} A_i B_j L_k = i\hbar(\vec{A} \times \vec{B})_k L_k = i\hbar(\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{L}.$$

4.11 Treba dokazati da je kvadrat momenta impulsa u sfernim koordinatama

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right)$$

na dva različita načina.

a) Pošto je $L^2 = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z$ a u sfernim koordinatama operatori sa desne strane jednakosti su

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right), \quad L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

pa dalje imamo da delujući na probnu funkciju $f(r, \theta, \varphi)$ leva i desna strana početne jednakosti daju

$$\begin{aligned}
 L^2 f &= \hbar^2 e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) e^{i\varphi} \left(\frac{\partial f}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial f}{\partial\varphi} \right) - \hbar^2 \frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2} - i\hbar^2 \frac{\partial f}{\partial\varphi} \\
 &= \hbar^2 e^{-i\varphi} \left(e^{i\varphi} \left(-\frac{\partial^2 f}{\partial\theta^2} + i \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial f}{\partial\varphi} - i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial^2 f}{\partial\varphi\partial\theta} \right) \right. \\
 &\quad \left. - \operatorname{ctg}\theta e^{i\varphi} \left(\frac{\partial f}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial f}{\partial\varphi} \right) + i \operatorname{ctg}\theta e^{i\varphi} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial\theta\partial\varphi} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2} \right) \right) \\
 &\quad - \hbar^2 \frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2} - i\hbar^2 \frac{\partial f}{\partial\varphi} \\
 &= -\hbar^2 \left(\underbrace{\frac{\partial^2 f}{\partial\theta^2} + \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial f}{\partial\theta}}_{\frac{1}{\sin\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial^2 f}{\partial\theta^2} + \cos\theta \frac{\partial f}{\partial\theta} \right)} + (\operatorname{ctg}^2\theta + 1) \frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2} \right) \\
 &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) f.
 \end{aligned}$$

b) U zadatku 4.3 smo dokazali da je

$$L^2 = \vec{r}^2 \vec{p}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})(\vec{r} \cdot \vec{p}) + i\hbar(\vec{r} \cdot \vec{p}).$$

U sfernim koordinatama su

$$\vec{r} = r\vec{e}_r, \quad \vec{p} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}\right).$$

Onda je i

$$\vec{r}^2 = r^2,$$

$$\vec{p}^2 = (-i\hbar\nabla)^2 = -\hbar^2 \Delta = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right),$$

$$(\vec{r} \cdot \vec{p}) = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r},$$

pa je

$$L^2 = \cancel{-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)} - \hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + \cancel{\hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)} + \cancel{\hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r}}$$

što predstavlja traženu formulu. Ovde je iskorišćeno

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) f = \left(r \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + r \frac{\partial}{\partial r} \right) f = r^2 \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial f}{\partial r}.$$

4.12 U prethodnom zadatku smo videli da je

$$\vec{p}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right),$$

kao i

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right).$$

Prepoznavamo da je onda

$$p_r^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right).$$

Ovaj član možemo napisati na različite načine (pogledati zadatak 1.6), na primer

$$p_r^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2,$$

pa je traženi operator

$$p_r = \pm i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r.$$

Određimo sad i komutator

$$[r, p_r]f = \pm r p_r f \mp p_r r f = \pm i\hbar r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r f \mp i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r^2 f = \pm i\hbar \left(f + r \frac{\partial f}{\partial r} - 2f + r \frac{\partial f}{\partial r} \right) = \mp i\hbar f.$$

Ako se opredelimo za donji znak, onda je komutaciona relacija između koordinate i njoj konjugovanog impulsa uobičajena.

4.13 Jednačina $L_+|l, l\rangle = 0$ u koordinatnoj reprezentaciji postaje

$$\hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_l^l(\theta, \varphi) = 0.$$

Razdvajanje promenljivih i činjenica da je $Y_l^l(\theta, \varphi) = T_l(\theta)F_l(\varphi)$ svojstvena funkcija operatora L_z omogućava da se odredi φ zavisnost koja je $F_l(\varphi) = e^{il\varphi} \sqrt{2\pi}$ (videti jednačinu (4.26)). Zato se jednačina po θ svodi na

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) T_l(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi} = 0 \Rightarrow \left(\frac{dT_l(\theta)}{d\theta} - l \operatorname{ctg} \theta T_l(\theta) \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi} = 0.$$

Dakle, diferencijalna jednačina koju zadovoljava funkcija $T_l(\theta)$ je

$$\frac{dT_l(\theta)}{d\theta} - l \operatorname{ctg} \theta T_l(\theta) = 0 \Rightarrow \frac{dT_l(\theta)}{T_l(\theta)} = l \frac{\cos \theta d\theta}{\sin \theta} \Rightarrow \ln T_l(\theta) = l \ln \sin \theta + \ln C_l,$$

pa je

$$T_l = C_l \sin^l \theta.$$

Konstantu C_l određujemo iz uslova normiranja

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta |T_l|^2 = 1 \Rightarrow C_l^2 \int_0^\pi \sin^{2l+1} \theta d\theta = 1.$$

Označimo sa

$$I_{2l} = \int_0^\pi \sin^{2l+1} \theta d\theta.$$

ovaj integral možemo da rešimo parcijalnom integracijom $u = \sin^{2l} \theta$ i $dv = \sin \theta d\theta$ pa je

$$I_{2l} = -\cos \theta \sin^{2l} \theta \Big|_0^\pi + 2l \int_0^\pi \sin^{2l-1} \theta \underbrace{\cos^2 \theta}_{1-\sin^2 \theta} d\theta = 2l(I_{2l-2} - I_{2l}) \Rightarrow I_{2l} = \frac{2l}{2l+1} I_{2l-2}.$$

Pošto je $I_0 = 2$, onda je

$$I_{2l} = 2 \frac{(2l)!!}{(2l+1)!!}.$$

Sad vidimo da je

$$C_l = \sqrt{\frac{(2l+1)!!}{2 \cdot (2l)!!}},$$

tako da je traženi sferni harmonik

$$Y_l^l(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{(2l+1)!!}{(2l)!!}} \sin^l \theta e^{il\varphi}.$$

Do ovog sfernog harmonika smo došli relativno jednostavno, a ostale možemo dobiti delovanjem operatora

$$L_- = \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right),$$

na $Y_l^l(\theta, \varphi)$ dovoljan broj puta.

4.14 Posmatračemo svojstvene vrednosti operatora L^2/\hbar^2 jer su uslovi za parametre α , β i γ isti. Dakle, treba da vidimo kad je

$$-\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)f(\theta,\varphi)=\lambda f(\theta,\varphi).$$

Kad se izračunaju izvodi koji deluju na $f(\theta,\varphi)=\cos^\alpha\theta\sin^\beta\theta\exp(i\gamma\varphi)$ i skрати dobijena jednačina imamo da važi

$$(\alpha(\alpha-1)\sin^4\theta-(\alpha(\beta+2)+\beta(\alpha+1))\sin^2\theta\cos^2\theta+\beta^2\cos^4\theta-\gamma^2\cos^2\theta)=-\lambda\cos^2\theta\sin^2\theta.$$

Prvi slučaj koji dovodi do netrivialnog rešenja je $\alpha=0$. Tad se gornja jednačina svodi na

$$-\beta\sin^2\theta\cos^2\theta+\beta^2\cos^4\theta-\gamma^2\cos^2\theta=-\lambda\cos^2\theta\sin^2\theta,$$

što je ekvivalentno sa

$$\beta^2(1-\sin^2\theta)-\gamma^2=(\beta-\lambda)\sin^2\theta,$$

a ova jednačina ima rešenja ako je

$$\beta=\pm\gamma, \quad \lambda=\beta(\beta+1).$$

Sledeći slučaj je $\alpha=1$. Tada mora da važi

$$-(3\beta+2)\sin^2\theta+\beta^2\cos^2\theta-\gamma^2=-\lambda\sin^2\theta$$

Ovo će biti zadovoljena za svako θ ako je

$$\beta=\pm\gamma, \quad \lambda=(\beta+1)(\beta+2)$$

Drugih rešenja nema, što se vidi ako se proba $\alpha=2$. Tada je nemoguće nametnuti uslov na β i γ tako da jednačina bude zadovoljena za bilo koju vrednost θ . Dakle, funkcije koja su svojstvene od L^2 a imaju traženi oblik su

$$f_{\alpha=0}=\sin^\beta\theta e^{\pm i\beta\varphi}, \quad f_{\alpha=1}=\cos\alpha\sin^\beta\theta e^{\pm i\beta\varphi}.$$

4.15 Veza Descartes-ovih (x, y, z) i cilindričnih (ρ, φ, z) koordinata zadata je sa

$$x=\rho\cos\varphi, \quad y=\rho\sin\varphi, \quad z=z,$$

dok su inverzne relacije

$$\rho=\sqrt{x^2+y^2}, \quad \varphi=\arctg\frac{y}{x}, \quad z=z.$$

Operatori podizanja i spuštanja z -komponente momenta impulsa su $L_\pm=L_x\pm iL_y$. Komponente momenta impulsa u Descartes-ovim koordinatama su

$$L_x=yp_z-zp_y=-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad L_y=zp_x-xp_z=-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right).$$

Sad je potrebno ove izraze napisati u cilindričnim koordinatama. Najpre tražimo

$$\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial\rho}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{\partial\varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\varphi}=\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\sin\varphi}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\cos \varphi}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Otud slede traženi operatori

$$\begin{aligned} L_{\pm} &= -i\hbar \left(\rho \sin \varphi \frac{\partial}{\partial z} - z \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} - z \frac{\cos \varphi}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \pm i \left(z \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} - z \frac{\sin \varphi}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \rho \cos \varphi \frac{\partial}{\partial z} \right) \right) \\ &= -i\hbar \left(\pm i (\cos \varphi \pm i \sin \varphi) z \frac{\partial}{\partial \rho} - (\cos \varphi \pm i \sin \varphi) \frac{z}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \mp i (\cos \varphi \pm i \sin \varphi) \rho \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ &= -i\hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm i z \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{z}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \mp i \rho \frac{\partial}{\partial z} \right). \end{aligned}$$

4.16 Rodrigues-ova formula daje Legendre-ove polinome

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} \left((\xi^2 - 1)^l \right).$$

Za $l = 0$ dobijamo Legendre-ov polinom

$$P_0(\xi) = 1.$$

I sledeći Legendre-ov polinom je jednostavan:

$$P_1(\xi) = \frac{1}{2} \frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1) = \frac{1}{2} 2\xi = \xi.$$

Kad je $l = 2$ Rodrigues-ova formula postaje

$$P_2(\xi) = \frac{1}{8} \frac{d^2}{d\xi^2} ((\xi^2 - 1)^2) = \frac{1}{2} \frac{d}{d\xi} (\xi^3 - \xi) = \frac{1}{2} (3\xi^2 - 1).$$

Četvrti Legendre-ov polinom je

$$P_3(\xi) = \frac{1}{48} \frac{d^3}{d\xi^3} ((\xi^2 - 1)^3) = \frac{1}{8} \frac{d^2}{d\xi^2} (\xi^5 - 2\xi^3 + \xi) = \frac{1}{2} (5\xi^3 - 3\xi).$$

Legendre-ovi polinomi su ortogonalni u odnosu na skalarni proizvod

$$\int_{-1}^1 dx P_n(x) P_m(x).$$

To može da se dokaže na osnovu Rodrigues-ove formule u opštem slučaju. Mi ćemo ovde proveriti da li je to tačno u konkretnom slučaju za $P_1(\xi)$ i $P_3(\xi)$:

$$\int_{-1}^1 \xi \frac{1}{2} (5\xi^3 - 3\xi) d\xi = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (5\xi^4 - 3\xi^2) d\xi = 5 \cdot \frac{2}{5} - 3 \cdot \frac{2}{3} = 0. \checkmark$$

Legendre-ove polinome možemo dobiti u *Mathematica*TM, komandom `LegendreP[n, x]` dobija se polinom $P_n(x)$.

4.17 Asocirane Legendre-ove funkcije $P_l^m(x)$ dobijamo iz Legendrovih polinoma. Indeks m uzima vrednosti $m = -l, -l+1, \dots, l$. Ako je $m \geq 0$ Legendre-ove funkcije su:

$$P_l^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x).$$

Za $m < 0$ Legendre-ova funkcija se dobija iz $P_l^m(x)$ za koje je $m > 0$ i jednaka je

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x).$$

Da vidimo kako to konkretno izgleda. Kada je $l = 0$, tada postoji samo jedna dozvoljena vrednost $m = 0$ i imamo

$$P_0^0(x) = 1.$$

Ako je $l = 1$, tad je $m = -1, 0, 1$ pa imamo tri funkcije. Najpre određujemo Legendrove funkcije za nenegativno m :

$$P_1^1(x) = -(1-x^2)^{1/2} \frac{d}{dx} P_1(x) = -\sqrt{1-x^2},$$

$$P_1^0(x) = (1-x^2)^0 P_1(x) = x,$$

Ostao je još slučaj $m = -1$:

$$P_1^{-1}(x) = (-1)^1 \frac{1}{2} P_1^1(x) = \frac{1}{2} \sqrt{1-x^2}.$$

Kad je $l = 2$ najpre nalazimo:

$$P_2^2(x) = (1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} P_2(x) = 3(1-x^2),$$

sledeća funkcija je

$$P_2^1(x) = (-1)(1-x^2)^{1/2} \frac{d}{dx} P_2(x) = -3x\sqrt{1-x^2},$$

a potom

$$P_2^0(x) = P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1).$$

Za negativne vrednosti m dobijamo

$$P_2^{-1}(x) = (-1) \frac{1}{6} P_2^1(x) = \frac{1}{2} x \sqrt{1-x^2},$$

i konačno

$$P_2^{-2}(x) = \frac{1}{24} P_2^2(x) = \frac{1}{8}(1-x^2).$$

U kontekstu upotrebe asociраних Legendre-ovih polinoma, često ćemo kao argument koristiti $x = \cos\theta$, pa je onda npr.

$$P_1^1(\cos\theta) = -\sqrt{1-\cos^2\theta} = -\sin\theta$$

i slično za ostale slučajeve. U *Mathematica*TM asociрана Legendre-ova funkcija $P_l^m(x)$ se dobija komandom LegendreP[1, m, x].

4.18 Sferni harmonici za $l = 1$ u sfernim koordinatama su:

$$Y_1^{-1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\varphi}, \quad Y_1^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta, \quad Y_1^1(\theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\varphi}.$$

Veza Descartes-ovih i sfernih koordinata je

$$x = r \sin\theta \cos\varphi, \quad y = r \sin\theta \sin\varphi, \quad z = r \cos\theta.$$

Iz ovih relacija možemo da nađemo kao izgledaju karakteristične funkcije koje se pojavljuju u sfernim harmonicima:

$$\sin\theta = \sqrt{\frac{x^2 + y^2}{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad \cos\theta = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad e^{\pm i\varphi} = \frac{x \pm iy}{\sqrt{x^2 + y^2}},$$

pa imamo

$$Y_1^{\pm 1}(x, y, z) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x \pm iy}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad Y_1^0(x, y, z) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}.$$

Kada je $l = 2$ imamo pet sfernih harmonika:

$$Y_2^{\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}, \quad Y_2^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_2^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2\theta - 1).$$

koji su u Descartes-ovim koodinatama

$$Y_2^{\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \frac{(x \pm iy)^2}{x^2 + y^2 + z^2}, \quad Y_2^{\pm 1}(x, y, z) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{z(x \pm iy)}{x^2 + y^2 + z^2},$$

$$Y_2^0(x, y, z) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left(\frac{3z^2}{x^2 + y^2 + z^2} - 1 \right).$$

4.19 U zadacima **4.11** i **4.12** videli smo odnos operatora \vec{p}^2 i L^2 i dobili da je

$$\vec{p}^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{r^2}.$$

Stoga se hamiltonijan može napisati na sledeći način

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2mr^2} + U(r).$$

Prvi i treći sabirak zavise od r , dok je ugaona zavisnost sadržana u drugom sabirku (kroz operator L^2). Razmotrimo najpre komutator $[H, L^2]$ On je jednak 0 jer L^2 komutira sa svakim sabirkom ponaosob. Naime, diferenciranje i množenje sa r (što su operacije u prvom i trećem sabirku) su nezavisne od izvoda po θ i φ , a drugi sabirak je srazmeran sa L^2 pa i on komutira sa L^2 . Dakle,

$$[H, L^2] = 0.$$

Slično je i sa L_z , komutira sa prvim i trećim sabirkom hamiltonijana iz istih razloga kao i L^2 , a sa drugim komutira jer je $[L^2, L_z] = 0$. To smo dokazali u zadatku **4.1**, a može se lako videti da to važi i kad se pogleda kako izgledaju ovi operatori. Prema tome, hamiltonijan koji opisuje kretanje čestice sa sferno-simetričnom potencijalnom energijom komutira sa kvadratom momenta L^2 i projekcijom momenta impulsa na z -osu L_z .

4.20 Talasnu funkciju možemo da napišemo u sfernim koodinatama

$$\psi(r, \theta, \varphi) = K(r \sin\theta \cos\varphi + ir \sin\theta \sin\varphi + r \cos\theta) e^{-\alpha r} = Kr (\sin\theta e^{i\varphi} + \cos\theta) e^{-\alpha r}.$$

- a) Uslov normiranja talasne funkcije omogućava da se odredi konstanta K

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

što daje

$$K^2 \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} r^4 \sin\theta e^{-2\alpha r} (1 + 2 \sin\theta \cos\theta \cos\varphi) dr d\theta d\varphi = 1$$

Integral koji potiče od drugog sabirka u zagradi je 0 (zbog integracije po uglu φ), pa preostaje samo da se odredi

$$K^2 4\pi \int_0^{\infty} r^4 e^{-2\alpha r} dr = 1,$$

što se smenom $x = 2\alpha r$ svodi na gama-funkciju

$$4\pi K^2 \frac{1}{(2\alpha)^5} \underbrace{\int_0^{\infty} x^4 e^{-x} dx}_{\Gamma(5)=4!} = 1 \Rightarrow K = \sqrt{\frac{\alpha^5}{3\pi}}.$$

- b) Očekivane vrednosti $\langle L^2 \rangle$ i $\langle L_z \rangle$ možemo naći na dva načina: prvi je pravolinijski i podrazumeva da u podintegralnoj funkciji napišemo operatore te izvršimo naznačena diferenciranja i množenja te na kraju izračunamo integral. Drugi način je dosta efikasniji i zasnovan je na poznatim osobinama sfernih harmonika

$$L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi),$$

$$L_z Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \varphi),$$

$$\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

Najpre ćemo ugaoni deo zavisnosti talasne funkcije napisati preko sfernih harmonika

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{\alpha^5}{3\pi}} r e^{-\alpha r} (\sin\theta e^{i\varphi} + \cos\theta) \\ &= \sqrt{\frac{\alpha^5}{3\pi}} r e^{-\alpha r} \left(-\sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^1 + \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0 \right) \\ &= \frac{2\alpha^{5/2}}{3} r e^{-\alpha r} \left(-\sqrt{2} Y_1^1 + Y_1^0 \right). \end{aligned}$$

Sad lako nalazimo

$$\begin{aligned} \langle L^2 \rangle &= \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} dr d\theta d\varphi r^2 \sin\theta \psi^*(r, \theta, \varphi) L^2 \psi(r, \theta, \varphi) \\ &= \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} dr d\theta d\varphi r^2 \sin\theta \frac{4\alpha^5}{9} r^2 e^{-2\alpha r} \left(-\sqrt{2} Y_1^1 + Y_1^0 \right)^* L^2 \left(-\sqrt{2} Y_1^1 + Y_1^0 \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{4\alpha^5}{9} \int_0^\infty dr r^4 e^{-2\alpha r} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\theta d\varphi \sin\theta \left(-\sqrt{2}Y_1^{1*} + Y_1^{0*}\right) 2\hbar^2 \left(-\sqrt{2}Y_1^1 + Y_1^0\right) \\
&= \frac{8\hbar^2\alpha^5}{9} \frac{4!}{(2\alpha)^5} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\theta d\varphi \sin\theta \left(2Y_1^{1*} Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^{1*} Y_1^0 - \sqrt{2}Y_1^{0*} Y_1^1 + Y_1^{0*} Y_1^0\right) \\
&= \frac{\hbar^2}{3} 2 \cdot (2+1) = 2\hbar^2.
\end{aligned}$$

Ovo je očekivan rezultat jer je ugaoni deo talasne funkcije linearna kombinacija sfernih harmonika za koje je $l = 1$. Na isti način određujemo i očekivanu vrednost od L_z

$$\begin{aligned}
\langle L_z \rangle &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} dr d\theta d\varphi r^2 \sin\theta \psi^*(r, \theta, \varphi) L_z \psi(r, \theta, \varphi) \\
&= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} dr d\theta d\varphi r^2 \sin\theta \frac{4\alpha^5}{9} r^2 e^{-2\alpha r} \left(-\sqrt{2}Y_1^{1*} + Y_1^{0*}\right) L_z \left(-\sqrt{2}Y_1^1 + Y_1^0\right) \\
&= \frac{4\alpha^5}{9} \int_0^\infty dr r^4 e^{-2\alpha r} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\theta d\varphi \sin\theta \left(-\sqrt{2}Y_1^{1*} + Y_1^{0*}\right) \hbar \left(-\sqrt{2}Y_1^1\right) \\
&= \frac{4\hbar\alpha^5}{9} \frac{4!}{(2\alpha)^5} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\theta d\varphi \sin\theta \left(2Y_1^{1*} Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^{1*} Y_1^0\right) = \frac{2\hbar}{3}.
\end{aligned}$$

- c) Da bismo odredili verovatnoću da se prilikom merenja opservable L_z dobije rezultat \hbar , potrebno je da posmatramo samo ugaoni deo talasne funkcije. Uočimo da u talasnoj funkciji možemo da razdvojimo r zavisnost od ugaone zavisnosti

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \underbrace{K_r r e^{-\alpha r}}_{f(r)} \underbrace{K_{\theta, \varphi} (\sin\theta e^{i\varphi} + \cos\theta)}_{Y(\theta, \varphi)}.$$

Svaki od ova dva dela je zasebno normiran i važi da je

$$K = K_r K_{\theta, \varphi},$$

gde je K određeno u a) delu ovog zadatka. Videli smo i da je

$$Y(\theta, \varphi) = K_{\theta, \varphi} \left(-\sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^1 + \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0\right)$$

Konstantu $K_{\theta, \varphi}$ određujemo iz uslova

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\theta d\varphi \sin\theta |Y(\theta, \varphi)|^2 = 1,$$

pa je

$$K_{\theta, \varphi}^2 \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\theta d\varphi \sin\theta \left(-\sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^{1*} + \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^{0*}\right) \left(-\sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^1 + \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0\right) = 1 \Rightarrow 4\pi K_{\theta, \varphi}^2 = 1,$$

tako da je ugaoni deo talasne funkcije

$$Y(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(-\sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^1 + \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0 \right) = -\sqrt{\frac{2}{3}} Y_1^1 + \sqrt{\frac{1}{3}} Y_1^0.$$

Pomoću Born-ovog pravila nalazimo verovatnoću da pri merenju opservable L_z dobije rezultat \hbar :

$$\text{ver}(L_z, \hbar, \psi) = \left| -\sqrt{\frac{2}{3}} \right|^2 = \frac{2}{3}.$$

4.21 Nađimo Taylor-ov razvoj talasne funkcije

$$\psi(\varphi + \alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n \psi(\varphi)}{d\varphi^n} \alpha^n.$$

Pošto je

$$L_z \psi(\varphi) = -i\hbar \frac{d\psi(\varphi)}{d\varphi} \Rightarrow \frac{d\psi(\varphi)}{d\varphi} = \frac{i}{\hbar} L_z \psi(\varphi).$$

Ako n puta primenimo operator sa leve i desne strane dobićemo da je

$$\frac{d^n \psi(\varphi)}{d\varphi^n} = \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n L_z^n \psi(\varphi).$$

Zato se formula za Taylor-ov razvoj može napisati

$$\psi(\varphi + \alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\alpha}{\hbar} \right)^n L_z^n \psi(\varphi) = e^{\frac{i}{\hbar} \alpha L_z} \psi(\varphi).$$

Ova formula pokazuje da je operator L_z generator rotacije oko z -ose.

4.22 Proverićemo Unsöld-ovu teoremu najpre za l ljusku ($l = 1$). Izračunajmo

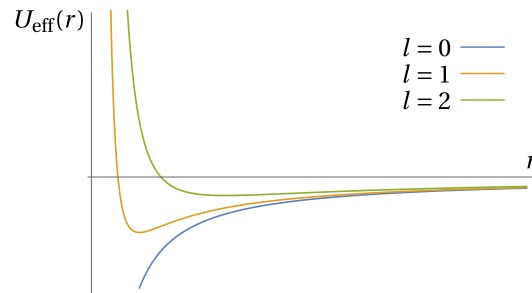
$$\begin{aligned} \sum_{m=-1}^1 |Y_1^m(\theta, \varphi)|^2 &= |Y_1^{-1}(\theta, \varphi)|^2 + |Y_1^0(\theta, \varphi)|^2 + |Y_1^1(\theta, \varphi)|^2 \\ &= \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta + \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta + \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta = \frac{3}{4\pi}. \end{aligned}$$

Za $l = 2$ imamo

$$\begin{aligned} \sum_{m=-2}^2 |Y_2^m(\theta, \varphi)|^2 &= |Y_2^{-2}(\theta, \varphi)|^2 + |Y_2^{-1}(\theta, \varphi)|^2 + |Y_2^0(\theta, \varphi)|^2 + |Y_2^1(\theta, \varphi)|^2 + |Y_2^2(\theta, \varphi)|^2 \\ &= 2 \cdot \frac{15}{32\pi} \sin^4 \theta + 2 \cdot \frac{15}{8\pi} \sin^2 \theta \cos^2 \theta + \frac{5}{16\pi} (3 \cos^2 \theta - 1)^2 \\ &= \frac{5}{16\pi} \left(3(1 - \cos^2 \theta)^2 + 12 \cos^2 (1 - \cos^2 \theta) + (3 \cos^2 \theta - 1)^2 \right) = \frac{5}{4\pi}. \end{aligned}$$

Time smo pokazali da za $l = 1$ i $l = 2$ važi Unsöld-ova teorema (slučaj $l = 0$ je trivijalan). U opštem slučaju ova teorema kaže da je

$$\sum_{m=-l}^l |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}.$$



Slika 4.1: Efektivna potencijalna energija elektrona u atomu vodonika za različite vrednosti l .

4.23 Efektivna potencijalna energija elektrona u atomu vodonika je (jednačine (4.47) ili (4.58))

$$U_{\text{eff}}(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}.$$

Sastoji se od dva sabirka: potencijalne energije i centrifugalne barijere, koju smo imali i u klasičnom slučaju. Da se podsetimo, tada je centrifugalna barijera bila $L^2/(2mr^2)$ a to je isti rezultat kao i u kvantnom slučaju jer je $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$. Za $l = 0$ efektivna potencijalna energija nema minimuma, rastuća je funkcija i jednaka je samoj potencijalnoj energiji. Za ostale vrednosti l efektivna potencijalna energija ima minimum koji se dobija iz

$$\left. \frac{dU_{\text{eff}}(r)}{dr} \right|_{r_0} = 0 \Rightarrow r_0 = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{Zme^2}$$

Kako l uzima vrednosti 1,2,3,... vidimo da se r_0 povećava, a za svako fiksno r porastom l raste i U_{eff} . Asimptotsko ponašanje u $r \rightarrow 0$ i $r \rightarrow \infty$ isto je za svako $l > 0$. Nekoliko karakterističnih zavisnosti dato je na slici 4.1.

4.24 Za oba sistema, hamiltonijan i moment impulsa sistema jednaki su

$$H = 2\frac{1}{2}Mv^2 = Mv^2, \quad L = 2Mv\frac{a}{2} = Mva,$$

tako da je

$$H = \frac{L^2}{Ma^2} = \frac{L^2}{2I}.$$

a) Vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina krutog rotatora je

$$\frac{L^2}{2I}\psi = E\psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2I} \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) \psi(\theta, \varphi) = E\psi(\theta, \varphi).$$

Pošto je svojstveni problem operatpra L^2 detaljno rešen u glavnom tekstu, iskoristićemo to rešenje da bismo odredili svojstvene energije i svojstvena stanja. Pošto je $L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 Y_l^m(\theta, \varphi)$, spektar energije određen je kvantnim brojem l

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}.$$

koji uzima vrednosti 0, 1, 2, ... Svojstvena stanja su sferni harmonici $Y_l^m(\theta, \varphi)$. Energija E_l je $(2l+1)$ puta degenerisana jer kvantni broj m uzima vrednosti $-l, -l+1, \dots, l$ i sva ta stanja imaju istu energiju.

- b) Ako posmatramo kruti rotator s fiksnom osom, on je efektivno jednodimenzionni sistem. Usmerimo koordinatni sistem tako da se z -osa poklapa sa osom rotacije. Tada se moment impulsa svodi samo na L_z komponentu pa je Schrödinger-ova jednačina za ovaj sistem

$$\frac{L_z^2}{2I} \psi = E\psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \psi(\varphi) = E\psi(\varphi) \Rightarrow \psi'' + \frac{2IE}{\hbar^2} \psi = 0.$$

Ova jednačina ima normalizabilno rešenje ako je

$$\frac{2IE}{\hbar^2} = m^2 \Rightarrow E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}.$$

Ovim smo odredili spektar energija. Svojstvena stanja su rešenja gornje diferencijalne jednačine $\psi(\varphi) = C e^{im\varphi}$. Granični uslov $\psi(0) = \psi(2\pi)$ daje $e^{im2\pi} = 1$ iz čega zaključujemo da $m \in \mathbb{Z}$. Osnovno stanje se dobija za $m = 0$ i ono je nedegenerisano, dok su ostala stanja dvostruko degenerisana, jer stanja ψ_m i ψ_{-m} imaju istu energiju. Konstantu C određujemo iz uslova normiranja

$$\int_0^{2\pi} d\varphi |C|^2 = 1 \Rightarrow 2\pi |C|^2 = 1 \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}},$$

tako da su talasne funkcije

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}.$$

4.25 Čestica se nalazi u sferno-simetričnom potencijalu $U(r)$. U tom slučaju rešenja Schrödinger-ove jednačine se mogu napisati u obliku proizvoda radialne talasne funkcije $R(r)$ i sfernog harmonika $Y_l^m(\theta, \varphi)$

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi).$$

Ovakva smena u Schrödinger-ovoj jednačini daje

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \right) \psi = E\psi &\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right) + U(r) \right) \psi = E\psi. \\ \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + U(r) \right) R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) &= ER(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

Pošto u ovoj jednačini više nemamo izvode po ugaoim koordinatama θ i φ , možemo je skratiti sa $Y_l^m(\theta, \varphi)$ i tako dobijamo radialnu jednačinu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) R(r) + \underbrace{\left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r) \right)}_{U_{\text{eff}}(r)} R(r) = ER(r),$$

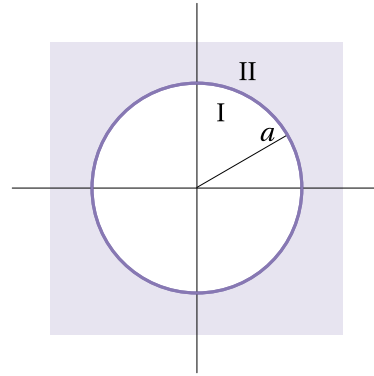
u kojoj prepoznamo efektivnu potencijalnu energiju, koju je moguće još pojednostaviti, ako umesto nepoznate funkcije $R(r)$ posmatramo $u(r) = rR(r)$. Ta smena pojednostavljuje prvi član

$$\frac{u}{r} \xrightarrow{\frac{d}{dr}} \frac{u'r - u}{r^2} \xrightarrow{\cdot r^2} u'r - u \xrightarrow{\frac{d}{dr}} u''r + u' - u' \xrightarrow{\cdot \frac{1}{r^2}} \frac{u''}{r}$$

tako da je radialni deo Schrödinger-ove jednačine za česticu u sferno-simetričnom potencijalu po nepoznatoj funkciji $u(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r) \right) u(r) = Eu(r).$$

U ovom i nekoliko narednih zadataka rešavaćemo ovu jednačinu u različitim konfiguracijama potencijalne energije.



Slika 4.2: Sferna barijera opisana u zadatku 4.25.

a) Kad je potencijalna energija čestice

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < a \\ \infty, & r > a \end{cases}.$$

prostor možemo podeliti (slika 4.2) na dve oblasti: I ($r < a$) u kojoj je $U(r) = 0$ i oblast II ($r > a$) gde je potencijalna energija beskonačna, pa je tu talasna funkcija jednaka nuli $\psi_{II} = 0$. U oblasti I radijalni deo Schrödinger-ove jednačine je

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_1(r)}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} u_1(r) = E u_1(r).$$

Ako tražimo rešenja za koja je $l = 0$ ova jednačina se dodatno pojednostavljuje

$$u_1''(r) = -\frac{2mE}{\hbar^2} u_1(r).$$

Pošto je minimum potencijalne energije $U_{\min} = 0$ imamo da je $E \geq 0$ pa je konstanta $2mE/\hbar^2 = k^2 > 0$. Rešenje ove jednačine je

$$u_1(r) = A \sin kr + B \cos kr, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Prisetimo se da je radijalna funkcija $R(r) = u(r)/r$

$$R_1(r) = \frac{A \sin kr + B \cos kr}{r}.$$

Da ova funkcija ne bi divergirala u graničnom slučaju $r \rightarrow 0$ potrebno je da izaberemo da je $B = 0$ (jer je $\cos kr/r \rightarrow \infty$ za $r \rightarrow 0$). Dakle, radijalno rešenje do na konstantu normiranja je

$$R_1(r) = \frac{A \sin kr}{r}.$$

Ovo rešenje zadovoljava granični uslov $R_1(r = a-) = 0$ iz koga se dobija spektar

$$\sin(ka) = 0 \Rightarrow k_n a = n\pi \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{a} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2},$$

a to je isti spektar kao kod čestice između beskonačnih zidova. Preostalo je još da odredimo i konstantu normiranja A . Ona je deo ukupnog rešenja Schrödinger-ove jednačine

$$\psi_1(r) = A \frac{\sin kr}{r} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}_{Y_0^0}.$$

Ovde je normalizacija radijalnog dela rešenja odvojena od ostatka talasne funkcije. Radijalni deo zadovoljava uslov

$$\int_0^{\infty} dr r^2 |R(r)|^2 = \int_0^{\infty} dr |u(r)|^2 = 1,$$

što u našem konkretnom slučaju daje

$$\int_0^a A^2 \sin^2 \frac{n\pi r}{a} dr = A^2 \int_0^a \frac{1 + \cos \frac{2n\pi r}{a}}{2} dr = A^2 \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Prema tome, konačno možemo da napišemo rešenje Schrödinger-ove jednačine za česticu u beskonačnoj sferno-simetričnoj jami za $l = 0$

$$\psi_{n00}(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{1}{r} \sin \frac{n\pi r}{a}, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}.$$

b) Kad je $l > 0$, radijalni deo Schrödinger-ove jednačine u oblasti I je

$$u_1''(r) = \left(-k^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_1(r)$$

gde je k ista konstanta kao i u prethodnom delu zadatka. Rešenje ove jednačine, za proizvoljno l se mogu napisati preko sferne Bessel-ove funkcije $j_l(x)$ i sferne Neumann-ove funkcije $n_l(x)$:

$$u_1(r) = Ar j_l(kr) + Br n_l(kr),$$

pri čemu su

$$j_l(x) = x^l \left(-\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x}, \quad n_l(x) = -x^l \left(-\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos x}{x}.$$

Uslov da je u $r \rightarrow 0$ talasna funkcija konačna ovde dovodi do toga da moramo uzeti da je $B = 0$. Zato je

$$R_1(r) = A j_l(kr).$$

Granični uslov $R(a-) = 0$ i u ovom slučaju određuje spektar. Konstanta k ima diskretne vrednosti i one se dobijaju kao rešenja jednačine

$$j_l(ka) = 0.$$

Za svako l Bessel-ova sferna funkcija $j_l(x)$ ima beskonačno nula (kao što i trigonometrijske funkcije imaju beskonačno nula). One nisu tako jednostavno raspoređene kao u slučaju $l = 0$, već se nalaze numeričkim rešavanjem gornje jednačine. Ako sa β_{nl} označimo n -tu nulu l -tog Bessel-ovog sfernog polinoma, onda je spektar energija

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 \beta_{nl}^2}{2ma^2},$$

a stanja su

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} A_{nl} j_l \left(\frac{\beta_{nl} r}{a} \right) Y_l^m(\theta, \varphi), & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}.$$

Ovde su A_{nl} konstante normiranja za koje takođe ne postoji jednostavan analitički izraz, ali se mogu naći. Kao što vidimo, stanje ψ_{nlm} je $(2l+1)$ puta degenerisano, jer energija ne zavisi od kvatnog broja m .

4.26 Oblik potencijalne energije sugerira da Schrödinger-ovu jednačinu posmatramo u dve oblasti, kada je $r < a$ (oblast I) i $r > a$ (oblast II).

Jednačina za radijalni deo talasne funkcije $u(r) = R(r)r$ u oblasti I je

$$u_I''(r) + \left(\frac{l(l+1)}{r^2} - U \right) u_I(r) = -\frac{2mE}{\hbar^2} u_I(r),$$

dok je u oblasti II

$$u_{II}''(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} u_{II}(r) = -\frac{2mE}{\hbar^2} u_{II}(r).$$

Ovde tražimo energiju osnovnog stanja. Primetimo da centrifugalna barijera uvek doprinosi ukupnoj energiji sa pozitivnim znakom. Pošto nas interesuje minimum energije, onda ćemo uzeti da je $l = 0$. Tada se gornje jednačine svode na

$$u_I''(r) - U u_I(r) = -\frac{2mE}{\hbar^2} u_I(r), \quad u_{II}''(r) = -\frac{2mE}{\hbar^2} u_{II}(r),$$

pri čemu važe granični uslovi $u_I(r \rightarrow 0) = 0$, $u_{II}(r \rightarrow \infty) = 0$ kao i neprekidnost funkcije $u(r)$ i njenog prvog izvoda na granici. Pažljivi čitalac će primetiti da smo se sreli sa istim problemom, kad smo u zadatku **2.38** tražili vezana stanja čestice u potencijalnoj jami

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ -U, & 0 < x < a \\ 0, & x > a \end{cases}.$$

Diferencijalne jednačine i granični uslovi za $\psi(x)$ su istovetne sa jednačinama i graničnim uslovima za funkciju $u(r)$. Zato su i rešenja za svojstvene energije i funkcije ista. Dakle, ako nastavimo da rešavamo gornje jednačine dobićemo da je uslov za pojavu vezanog stanja isti kao u zadatku **2.38**

$$\sqrt{\frac{2ma^2U}{\hbar^2}} \geq \frac{\pi}{2},$$

iz čega sledi da je minimalna dubina jame za koju se pojavljuju vezana stanja

$$U_{\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

Primetimo da je rešavanje Schrödinger-ove jednačine sa sferno-simetričnom potencijalnom energijom $U(r)$ za $l = 0$ ekvivalentno sa problemom jednodimenzionalne Schrödinger-ove jednačine kod koje je potencijalna energija

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ U(x), & x > 0 \end{cases}.$$

4.27 Hamiltonijan dvodimenzionog harmonijskog oscilatora je

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2) = \underbrace{\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2}_{H(x)} + \underbrace{\frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2}_{H(y)}.$$

Ovaj hamiltonijan je separabilan – može se posmatrati kao dva odvojena sistema. Ukupna talasna funkcija je proizvod dve talasne funkcije a ukupna energija je zbir energija koje potiču od

hamiltonijana delova sistema. Ovde je svaki od delova sistema jednodimenzioni harmonijski oscilator. Zato je spektar energije

$$E_{n_x, n_y} = \hbar\omega \left(n_x + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \left(n_y + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega (n_x + n_y + 1),$$

gde su n_x i n_y prirodni brojevi ili 0. Svojtvene funkcije hamiltonijana su proizvodi rešenja jednodimenzionih harmonijskih oscilatora

$$\psi_{n_x, n_y}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2^{n_x} 2^{n_y} n_x! n_y!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)} H_{n_x} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) H_{n_y} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} y \right).$$

Svojtveni problem dvodimenzionog harmonijskog oscilatora se može napisati i u bazu svojstvenih stanja jednodimenzionih hamiltonijana

$$H|n_x\rangle|n_y\rangle = \hbar\omega(n_x + n_y + 1)|n_x\rangle|n_y\rangle,$$

Stanje $|n_x\rangle|n_y\rangle$ je uređeni proizvod: prvi kvantni broj se odnosi na x zavisnost talasne funkcije a drugi dolazi od y zavisnosti. Zapravo, ako svojstvena stanja jednodimenzionih problema posmatramo kao vektore onda je ovo tenzorski proizvod, a ako ih gledamo kao funkcije onda je ovo stanje proizvod funkcija pri čemu je prva funkcija od x a druga zavisi od y . Ako uvedemo nov kvantni broj $n = n_x + n_y$ koji određuje energiju imamo da je $E_n = \hbar\omega(n + 1)$. Kao i kod jednodimenzionog oscilatora i u dvodimenzionom slučaju spektar je ekvidistantan, ali ovde imamo još i degeneraciju. Nivo E_n može se realizovati na $n + 1$ različit način (jer svaki sabirak može uzeti jednu od vrednosti između 0 i $n + 1$). Zato svojstvena stanja hamiltonijana ne određuju jednoznačno svojstvene pravce. Da bismo ih našli, treba nam još bar jedan operator koji komutira sa H . Taj operator je L_z . Lako se pokazuje da je

$$\begin{aligned} [H, L_z] &= \left[\frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2, x p_y - y p_x \right] \\ &= \frac{1}{2m} \underbrace{[p_x^2, x]}_{-2i\hbar p_x} p_y - \frac{1}{2m} \underbrace{[p_y^2, y]}_{-2i\hbar p_y} p_x - \frac{1}{2}m\omega^2 y \underbrace{[x^2, p_x]}_{2i\hbar x} + \frac{1}{2}m\omega^2 x \underbrace{[y^2, p_y]}_{2i\hbar y} \\ &= -\frac{i\hbar}{m} p_x p_y + \frac{i\hbar}{m} p_y p_x - i\hbar m\omega^2 y x + i\hbar m\omega^2 x y \\ &= 0. \end{aligned}$$

Stanja dvodimenzionog harmonijskog oscilatora možemo da opišemo kao zajedničke svojstvene vektore od H i L_z i neka je n povezan za svojstvenu vrednost kamiltonijana, a m sa z -komponentom momenta impulsa

$$H|n, m\rangle = \hbar\omega(n + 1)|n, m\rangle, \quad L_z|n, m\rangle = m\hbar|n, m\rangle.$$

Sad ćemo na konkretnim slučajevima da vidimo vezu između dva bazu, jednog koji je opisan sa energijama jednodimenzionalnih oscilatora $|n_x\rangle|n_y\rangle$ i drugog u kome su kvantni brojevi energija dvodimenzionog oscilatora i njegov moment impulsa $|n, m\rangle$.

Osnovno stanje se dobija kad je $n = 0$. Tada je $n_x + n_y = 0$, što ima samo jedno rešenje $n_x = n_y = 0$. Talasna funkcija je

$$\psi_{|0\rangle|0\rangle} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2}$$

Ova talasna funkcija je svojstvena i za H i za L_z . Ako hamiltonijan napišemo u polarnim koordinatama

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2$$

vidimo da je

$$H\psi_{|0\rangle|0\rangle} = \hbar\omega\psi_{|0\rangle|0\rangle},$$

dok je

$$L_z\psi_{|0\rangle|0\rangle} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2} = 0,$$

što znači da je

$$|0\rangle|0\rangle = |00\rangle.$$

Za $n = 1$ energijski nivo je dvostruko degenerisan.

$$\psi_{|1\rangle|0\rangle} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{m\omega}{\hbar} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{m\omega}{\hbar} r \cos\varphi e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2}.$$

$$\psi_{|0\rangle|1\rangle} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{m\omega}{\hbar} y e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{m\omega}{\hbar} r \sin\varphi e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2}.$$

Ova stanja su svojstvena za H , sa svojstvenom vrednošću $2\hbar\omega$, ali nisu svojstvena i za L_z . Znamo od ranije da su stanja $e^{\pm i\varphi}$ svojstvena od L_z sa svojstvenom vrednošću $\pm\hbar$. Od stanja koje imamo, lako možemo da napravimo željeni oblik φ zavisnosti, potrebno je samo da formiramo linearne kombinacije:

$$\psi_{|1\rangle|0\rangle} + i\psi_{|0\rangle|1\rangle} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{m\omega}{\hbar} r e^{i\varphi} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2},$$

i

$$\psi_{|1\rangle|0\rangle} - i\psi_{|0\rangle|1\rangle} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{m\omega}{\hbar} r e^{-i\varphi} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2},$$

koje su svojstvene funkcije i za L_z sa svojstvenim vrednostima \hbar i $-\hbar$ respektivno. Ove funkcije će biti normirane ako ih podelimo sa $\sqrt{2}$. Gornja stanja možemo da označimo preko svojstvenih vrednosti H i L_z , prvo je $|1, 1\rangle$ a drugo $|1, -1\rangle$. Veza sa prvim bazisom je

$$|1, 1\rangle = \frac{|1\rangle|0\rangle + i|0\rangle|1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |1, -1\rangle = \frac{|1\rangle|0\rangle - i|0\rangle|1\rangle}{\sqrt{2}}.$$

4.28 Ako invertujemo relacije

$$\vec{R} = \frac{m_p \vec{X}_p + m_e \vec{X}_e}{m_p + m_e}, \quad \vec{r} = \vec{X}_e - \vec{X}_p,$$

dobijamo:

$$\vec{X}_e = \vec{R} + \frac{m_p}{m_p + m_e} \vec{r}, \quad \vec{X}_p = \vec{R} - \frac{m_e}{m_p + m_e} \vec{r}.$$

Lako se pokazuje da je lagranžijan sistema moguće prepisati u obliku:

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2} m_p \dot{\vec{X}}_p^2 + \frac{1}{2} m_e \dot{\vec{X}}_e^2 - \frac{e^2}{|\vec{X}_e - \vec{X}_p|} \\ &= \frac{1}{2} m_p \left(\dot{\vec{R}} - \frac{m_e}{m_p + m_e} \dot{\vec{r}} \right)^2 + \frac{1}{2} m_e \left(\dot{\vec{R}} + \frac{m_p}{m_p + m_e} \dot{\vec{r}} \right)^2 - \frac{e^2}{r} \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2}(m_p + m_e)\dot{R}^2 + \frac{1}{2} \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \dot{r}^2 - \frac{e^2}{r},$$

Konjugovani impulsi su

$$\vec{P}_{\vec{R}} = \vec{P} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{R}}} = (m_p + m_e)\dot{\vec{R}}, \quad \vec{P}_{\vec{r}} = \vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \dot{\vec{r}},$$

što može da se prepiše kao

$$\vec{P} = \vec{P}_p + \vec{P}_e, \quad \vec{p} = \frac{m_p \vec{P}_e - m_e \vec{P}_p}{m_p + m_e}.$$

Određimo sad tražene komutatore. Koristićemo sledeće komutacione relacije

$$[(\vec{X}_e)_i, (\vec{P}_e)_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [(\vec{X}_p)_i, (\vec{P}_p)_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [(\vec{X}_e)_i, (\vec{P}_p)_j] = [(\vec{X}_p)_i, (\vec{P}_e)_j] = 0$$

i imamo

$$\begin{aligned} [(\vec{R})_i, (\vec{P})_j] &= \left[\frac{m_p (\vec{X}_p)_i + m_e (\vec{X}_e)_i}{m_p + m_e}, (\vec{P}_p)_j + (\vec{P}_e)_j \right] \\ &= \frac{m_p}{m_p + m_e} ([(\vec{X}_p)_i, (\vec{P}_p)_j] + [(\vec{X}_p)_i, (\vec{P}_e)_j]) + \frac{m_e}{m_p + m_e} ([(\vec{X}_e)_i, (\vec{P}_p)_j] + [(\vec{X}_p)_i, (\vec{P}_p)_j]) \\ &= \frac{m_p}{m_p + m_e} (i\hbar\delta_{ij} + 0) + \frac{m_e}{m_p + m_e} (i\hbar\delta_{ij} + 0) \\ &= i\hbar\delta_{ij}. \end{aligned}$$

Slično tome je

$$\begin{aligned} [(\vec{R})_i, (\vec{p})_j] &= \left[\frac{m_p (\vec{X}_p)_i + m_e (\vec{X}_e)_i}{m_p + m_e}, \frac{m_p (\vec{P}_e)_j - m_e (\vec{P}_p)_j}{m_p + m_e} \right] \\ &= \frac{m_p^2 [(\vec{X}_p)_i, (\vec{P}_e)_j] - m_p m_e [(\vec{X}_p)_i, (\vec{P}_p)_j] + m_e m_p [(\vec{X}_e)_i, (\vec{P}_e)_j] - m_e^2 [(\vec{X}_e)_i, (\vec{P}_p)_j]}{(m_p + m_e)^2} \\ &= \frac{0 - m_p m_e i\hbar\delta_{ij} + m_p m_e i\hbar\delta_{ij} - 0}{(m_p + m_e)^2} \\ &= 0. \end{aligned}$$

Na isti način bi se pokazalo i da je $[(\vec{r})_i, (\vec{P})_j] = 0$.

4.29 Radijalna jednačina za funkciju $u(r) = rR(r)$ atoma vodonika je (4.58)

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} u''(r) + \left(-\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} - E \right) u(r) = 0.$$

a) Gornja jednačina može se prevesti u bezdimenzionalnu formu. Najpre je pomnožimo sa $-\hbar^2/(2m_e)$

$$u''(r) + \left(\frac{2m_e Z e^2}{\hbar^2} \frac{1}{r} - l(l+1) \frac{1}{r^2} + \frac{2m_e E}{\hbar^2} \right) u(r) = 0.$$

Pošto je energija $E < 0$ uvedimo konstantu ϵ

$$-\frac{2m_e E}{\hbar^2} = \left(\frac{\epsilon}{2} \right)^2,$$

pa jednačina postaje

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left(-\left(\frac{\epsilon}{2}\right)^2 + \frac{2m_e Z e^2}{\hbar^2} \frac{1}{r} - l(l+1) \frac{1}{r^2} \right) u(r) = 0.$$

Uvedimo novu promenljivu $x = r\epsilon$. Izvodi po r i po x su povezani na sledeći način

$$\frac{d}{dr} = \frac{dx}{dr} \frac{d}{dx} = \epsilon \frac{d}{dx}, \quad \frac{d^2}{dr^2} = \epsilon^2 \frac{d^2}{dx^2},$$

pa se diferencijalna jednačina po x svosi na:

$$u''(x) + \left(-\frac{1}{4} + \frac{2m_e Z e^2}{\epsilon \hbar^2} \frac{1}{x} - l(l+1) \frac{1}{x^2} \right) u(x) = 0.$$

b) Diferencijalna jednačina

$$y''(x) + \left(-\frac{1}{4} + \frac{2j+k+1}{2} \frac{1}{x} - \frac{k^2-1}{4} \frac{1}{x^2} \right) y(x) = 0.$$

ima dve singularne tačke: u $x = 0$ regularnu i u $x = \infty$ iregularnu. Ispitujući asimptotsko ponašanje u okolini te dve tačke ispostavlja se da je rešenje jednačine oblika

$$y(x) = e^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{k+1}{2}} f(x).$$

Sad ćemo da vidimo kako se ponaša funkcija $f(x)$. Da bismo dobili diferencijalnu jednačinu po koju zadovoljava ta funkcija, potrebno je da nađemo drugi izvod od $y(x)$

$$y'' = e^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{k+1}{2}} \left(f''(x) + \frac{1-x+k}{x} f'(x) + \frac{k^2-1-2kx-2x+x^2}{4x^2} f(x) \right).$$

Ubacimo pretpostavljeno rešenje i jednačina se znatno pojednostavi

$$e^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{k+1}{2}} \left(f''(x) + \frac{1-x+k}{x} f'(x) + \frac{j}{x} f(x) \right) = 0,$$

pa je

$$x f''(x) + (1-x+k) f'(x) + j f(x) = 0.$$

Ovo je asocirana Laguerre-ova jednačina i njeno rešenje su asocirani Laguerre-ovi polinomi $f(x) = L_j^k(x)$. Dakle, rešenje date diferencijalne jednačine je

$$y = e^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{k+1}{2}} L_j^k(x).$$

c) Poredeći diferencijalne jednačine za $y(x)$ i $u(x)$ vidimo da one imaju isti oblik i potrebno je da bude zadovoljeno

$$\frac{2j+k+1}{2} = \frac{2m_e Z e^2}{\epsilon \hbar^2}, \quad \frac{k^2-1}{4} = l(l+1).$$

Iz druge jednačine sledi da je $k = 2l + 1$, a onda i prva jednačina postaje

$$j+l+1 = \frac{2m_e Z e^2}{\epsilon \hbar^2}.$$

Pošto su j i l prirodni brojevi ili 0 (to znamo iz rešenja asocirane Laguerre-ove jednačine) onda je $n = j + l + 1 \in \mathbb{N}$.

- d) Setimo se kako je energija elektrona E povezana s parametrom ϵ , a ovaj s prirodnim brojem n

$$E = -\frac{\hbar^2 \epsilon^2}{8m_e} = -\frac{m_e Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} \Rightarrow E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2}$$

Time smo odredili spektar i dobili isti rezultat (4.73) kao kad je to izračunato Frobeniusovom metodom. Preostalo je da nađemo i radijalnu talasnu funkciju. ponovo poredimo $y(x)$ i $u(x)$. Dobili smo da je $k = 2l + 1$ a parametra j u rešenju za $y(x)$ može da se napiše preko n i l

$$j = n - l - 1.$$

Zato je rešenje za u

$$u(x) = u(\epsilon r) = u\left(\frac{2Z}{na_0} r\right) = e^{-\frac{Zr}{na_0}} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{\frac{2l+1}{2}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right),$$

odnosno, radijalna funkcija $R(r) = u(r)/r$ je

$$R_{nl}(r) = C_{nl} e^{-\frac{Zr}{na_0}} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right).$$

Normalizacione konstante određujemo iz uslova

$$\int_0^{\infty} dr r^2 R_{nl}^2(r) = 1,$$

što daje

$$C_{nl}^2 \int_0^{\infty} dr r^2 e^{-2\frac{Zr}{na_0}} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{2l} \left(L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)\right)^2 = 1$$

ili malo sređeno

$$C_{nl}^2 \left(\frac{na_0}{2Z}\right)^3 \int_0^{\infty} dx e^{-x} x^{2l+2} \left(L_{n-l-1}^{2l+1}(x)\right)^2 = 1.$$

Da bismo odredili ovaj integral koristićemo osobine asociiranih Laguerre-ovih polinoma

$$\int_0^{\infty} dx x^a e^{-x} L_n^a(x) L_m^a(x) dx = \delta_{nm} \frac{\Gamma(a+n+1)^3}{\Gamma(n+1)},$$

koja je neka vrsta ortogonalnosti i

$$xL_n^a(x) = (a+2n+1)L_n^a(x) - \frac{n+1}{a+n+1}L_{n+1}^a(x) - (a+n)^2L_{n-1}^a(x)$$

pomoću koje ćemo u podintegralnoj funkciji x^{2l+2} svesti na x^{2l+1} nakon čega ćemo iskoristiti relaciju ortogonalnosti. Vidimo da je

$$xL_{n-l-1}^{2l+1}(x) = 2nL_{n-l-1}^{2l+1}(x) - \frac{n-l}{n+l+1}L_{n-l}^{2l+1}(x) - (n+l)^2L_{n-l-2}^{2l+1}(x),$$

tako da je sad moguće izračunati integral

$$C_{nl}^2 \left(\frac{na_0}{2Z}\right)^3 2n \frac{\Gamma(n+l+1)^3}{\Gamma(n-l)} = 1 \Rightarrow C_{nl} = \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}}$$

te imamo da je konačno

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}} e^{-\frac{Zr}{na_0}} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right).$$

4.30 Radijalni delovi talasne funkcije $R_{nl}(r)$ elektrona u atomu vodonika (formula (4.76) i prethodni zadatak) su dati sa

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}} e^{-\frac{Zr}{na_0}} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)$$

gde su $L_n^k(\xi)$ asocirani Laguerre-ovi polinomi (4.74) koji su definisani preko Laguerre-ovih polinoma $L_n(\xi)$

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n),$$

na sledeći način

$$L_n^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} L_{n+k}(x).$$

Konstruisaćemo radijalne delove talasne funkcije za $n = 1$ i $n = 2$. Da bismo pojednostavili oznake, najpre ćemo uvesti parametar $x_n = 2Zr/na_0$. Ako je $n = 1$, tada je $l = 0$. Stoga postoji samo jedna radijalna funkcija

$$R_{10}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-x_1/2} L_0^1(x_1).$$

Da bismo odredili

$$L_0^1(x) = -\frac{d}{dx} L_1(x),$$

treba nam

$$L_1(x) = e^x \frac{d}{dx} (e^{-x} x) = e^x (-e^{-x} x + e^{-x}) = 1 - x,$$

tako da je

$$L_0^1(x) = -\frac{d}{dx} (1 - x) = 1.$$

Prema tome, imamo da je

$$R_{10}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-x_1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}}.$$

Ako je $n = 2$ tada l može biti 0 ili 1. Odredimo najpre $R_{20}(r)$ za koji formula glasi

$$R_{20}(r) = \frac{1}{2^{5/2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-x_2/2} L_1^1(x_2).$$

Nađimo

$$L_2(x) = e^x \frac{d^2}{dx^2} (e^{-x} x^2) = x^2 - 4x + 2,$$

pa je onda

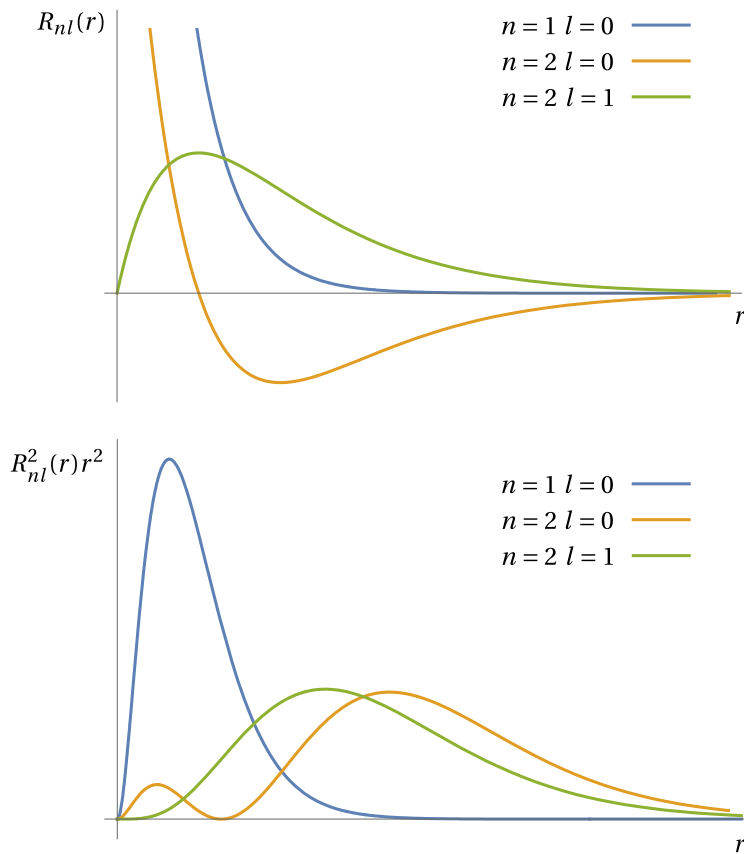
$$L_1^1(x) = -\frac{d}{dx} L_2(x) = -2x + 4,$$

te je

$$R_{20}(r) = 2 \frac{1}{2^{5/2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-x_2/2} (2 - x_2) = \frac{1}{2^{3/2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right).$$

Za $n = 2$ i $l = 1$ imamo

$$R_{21}(r) = \frac{1}{12\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-x_2/2} x_2 L_0^3(x_2).$$



Slika 4.3: Radijalne funkcije $R_{nl}(r)$ i radijalne gustine verovatnoće $r^2 R_{nl}^2(r)$ elektrona u atomu vodonika za $n = 1$ i $n = 2$.

Nalazimo najpre

$$L_3(x) = e^x \frac{d^3}{dx^3} (e^{-x} x^3) = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6,$$

i potom

$$L_0^3(x) = -\frac{d^3}{dx^3} L_3(x) = 6,$$

pa je

$$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \frac{Zr}{a_0}.$$

Sad možemo da nacrtamo radijalne funkcije, kao i odgovarajuće radijalne gustine verovatnoće $\rho_{nl}(r) = r^2 R_{nl}^2(r)$ što je prikazano na slici 4.3.

4.31 U atomskoj fizici pojavljuju se četiri karakteristične konstante dimenzije dužine, pa se stoga mogu porediti, a sve su kombinacije fundamentalnih konstanti. Prva je Compton-ova talasna dužina

$$\lambda_C = \frac{\hbar}{mc}$$

(jednačina (1.68)). To je karakteristična promena talasne dužine γ -kvanta koji se rasejava na slobodnom elektronu, kao i talasna dužina ultrarelativističkih elektrona (de-Broglie-eva formula). Sledeća konstanta koja se pojavila kod proučavanja atoma vodonika je Bohr-ov radijus

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

koji predstavlja karakteristično rastojanje na kojima se uočava promena talasne funkcije elektrona u atomu. Vidimo da je

$$\frac{\lambda_C}{a_0} = \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha = \frac{1}{137},$$

gde je α konstanta fine strukture. Karakteristična talasna dužina svetlosti koja nastaje pri promeni stanja elektrona u atomu je

$$\lambda = \frac{c}{\omega} = \frac{\hbar c}{\Delta E} = \frac{\hbar c}{\frac{e^2}{a_0}} = \frac{a_0}{\alpha} \Rightarrow \frac{a_0}{\lambda} = \alpha = \frac{1}{137}.$$

Klasični poluprečnik elektrona definisan je preko $mc^2 = e^2/r$ i iznosi

$$r = \frac{e^2}{mc^2} = \frac{e^2}{\frac{\hbar c}{\lambda_C}} = \lambda_C \alpha \Rightarrow \frac{r}{\lambda_C} = \alpha = \frac{1}{137}.$$

Dakle, vidimo da postoje u atomskoj fizici možemo da uočimo četiri različite skale (razlikuju se za po dva reda veličine). Na najvećoj skali su talasne dužine prelaza među atomskim nivoima, dva reda veličine je manji Bohr-ov radijus, pa nakon toga imamo Compton-ovu talasnu dužinu i na kraju na najmanjoj skali imamo klasični poluprečnik elektrona.

4.32 Radijalna gustina verovatnoće predstavlja odnos verovatnoće nalaženja čestice u sfernoj ljusci između r i $r + dr$ i debljine te ljuske dr

$$\frac{d\text{ver}(r, r + dr)}{dr} = \frac{\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} d\theta d\varphi r^2 \sin\theta R(r)^2 |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2}{dr} = r^2 R(r)^2,$$

gde je $R(r)$ rešenje radijalnog dela Schrödinger-ove jednačine. U osnovnom stanju $n = 1$ radijalni deo talasne funkcije je

$$R_{10}(r) = C_{10} e^{-\frac{r}{a_0}},$$

pa je radijalna gustina verovatnoće

$$\rho(r) = C_{10}^2 r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}},$$

Ova funkcija ima maksimum na rastojanju r_m

$$\left. \frac{d\rho(r)}{dr} \right|_{r_m} = 0 \Rightarrow 2r_m e^{-\frac{2r_m}{a_0}} \left(1 - \frac{r_m}{a_0} \right) = 0.$$

Ova jednačina ukazuje da $\rho(r)$ ima tri ekstremne vrednosti u $r = 0$, $r = a_0$ i $r = \infty$. U prvoj i trećoj tački gustina verovatnoće je minimalna, a maksimum je za $r_m = a_0$, za Bohr-ov radijus. U Bohr-ovom modelu to je poluprečnik prve Bohr-ove orbite.

4.33 Očekivana vrednost $\langle r \rangle$ rastojanja elektrona od jezgra u n -tom svojstvenom stanju maksimalnog momenta impulsa ($l = n - 1$) može se izračunati na osnovu radijalne gustine verovatnoće $R_{n,n-1}(r)$

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r R_{n,n-1}^2(r) r^2 dr,$$

dok je kvadrat disperzije

$$\Delta r^2 = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2.$$

Radijalna gustina verovatnoće je

$$R_{n,n-1}(r) = C e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{n-1} L_0^{2n-1}\left(\frac{2r}{na_0}\right).$$

Asocirani Laguerre-ovi polinomi $L_0^{2n-1}(x)$ su konstante. To vidimo jer je

$$L_0^{2n-1}(x) = -\frac{d^{2n-1}}{dx^{2n-1}} L_{2n-1}(x)$$

a $L_{2n-1}(x)$ je polinom stepena $2n-1$, pa je njegov $2n-1$ -vi izvod konstanta. Sad možemo da pišemo da je

$$R_{n,n-1}(r) = C e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{n-1}.$$

Najpre ćemo na osnovu uslova normiranja odrediti konstantu C :

$$C^2 \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{2n-2} r^2 dr = 1 \Rightarrow C^2 \left(\frac{na_0}{2}\right)^3 \int_0^\infty e^{-t} t^{2n} dt = 1 \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}}.$$

Pošto nam je poznata čitava radijalna gustina verovatnoće

$$R_{n,n-1}(r) = \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{n-1},$$

određivanje očekivanih vrednosti se svodi na računanje integrala, odnosno na prepoznavanje odgovarajućih gama-funkcija. Tako je

$$\langle r \rangle = \frac{1}{(2n)!} \left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{2n-2} r^3 dr = \frac{n(2n+1)}{2} a_0,$$

kao i

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{(2n)!} \left(\frac{2}{na_0}\right)^4 \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{2n-2} r^3 dr = \frac{n^2(n+1)(2n+1)}{2} a_0^2,$$

pa je disperzija

$$\Delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2} = \frac{n\sqrt{2n+1}}{2} a_0.$$

Kako raste energija elektrona (odnosno kvantni broj n) povećava se i Δr pa zaključujemo da su orbite bolje definisane za malo n .

4.34 Pošto je $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$, onda je i

$$\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle,$$

u bilo kom stanju.

a) Kad je elektron u osnovnom stanju, opisan je talasnom funkcijom

$$\psi_{100}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}.$$

Određimo najpre $\langle r^2 \rangle$ u osnovnom stanju. Imamo da je

$$\langle r^2 \rangle_{100} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} dr d\theta d\varphi r^2 \sin\theta r^2 |\psi_{100}(r)|^2 = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} dr d\theta d\varphi r^2 \sin\theta r^2 \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} = 3a_0^2.$$

Pošto je stanje sfernosimetrično $\psi_{100}(r)$ onda je $\langle x^2 \rangle_{100} = \langle y^2 \rangle_{100} = \langle z^2 \rangle_{100}$, pa sledi

$$\langle x^2 \rangle_{100} = \langle y^2 \rangle_{100} = \langle z^2 \rangle_{100} = \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle_{100} = a_0^2.$$

b) Talasna funkcija elektrona sad je

$$\psi_{210}(r, \theta, \varphi) = R_{21}(r) Y_1^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{r}{a_0^{5/2}} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta.$$

Ovo stanje nije sfernosimetrično pa nećemo moći da očekivane vrednosti kvadrata Descartes-ovih koordinata na isti način kao u prethodnom delu zadatka, nego ćemo morati da ih računamo neposredno.

$$\langle x^2 \rangle_{210} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} dr d\theta d\varphi r^2 \sin\theta r^2 \sin^2\theta \cos^2\varphi \frac{1}{24} \frac{r^2}{a_0^5} e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{3}{4\pi} \cos^2\theta = 6a_0^2.$$

Isto se dobija i za

$$\langle y^2 \rangle_{210} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} dr d\theta d\varphi r^2 \sin\theta r^2 \sin^2\theta \sin^2\varphi \frac{1}{24} \frac{r^2}{a_0^5} e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{3}{4\pi} \cos^2\theta = 6a_0^2,$$

jer se podintegralne funkcije razlikuju samo po φ zavisnosti, a integrali po φ se ne razlikuju. Ostaje još da se izračuna

$$\langle z^2 \rangle_{210} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} dr d\theta d\varphi r^2 \sin\theta r^2 \cos^2\theta \frac{1}{24} \frac{r^2}{a_0^5} e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{3}{4\pi} \cos^2\theta = 18a_0^2.$$

Sad nalazimo da je

$$\langle r^2 \rangle_{210} = \langle x^2 \rangle_{210} + \langle y^2 \rangle_{210} + \langle z^2 \rangle_{210} = 30a_0^2,$$

i to se slaže sa rezultatom dobijenim u prethodnom delu zadatka za $n = 2$ kada je očekivana vrednost određena direktno.

4.35 Cilj ovog zadatka je da napišemo Schrödinger-ovu jednačinu za atom vodonika

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta\psi - \frac{e^2}{r} \psi = E\psi,$$

u parabolčkim koordinatama (ξ, η, φ) koje su definisane su sa

$$\xi = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} + z, \quad \eta = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} - z, \quad \varphi = \arctan \frac{y}{x},$$

i da rešimo dobijenu Schrödinger-ovu jednačinu.

a) Najpre ćemo invertovati jednačine koje definišu paraboliske koordinate. Vidimo da je

$$\frac{\xi + \eta}{2} = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad z = \frac{\xi - \eta}{2}, \quad \operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x}.$$

Time smo koordinatu z izrazili preko paraboliskih koordinata, preostale su još x i y . Kvadrirajući prvu i treću jednačinu, uz korišćenje druge, dobija se

$$x^2 + y^2 = \eta\xi, \quad y^2 = x^2 \operatorname{tg} \varphi,$$

pa su

$$x = \sqrt{\xi\eta} \cos \varphi, \quad y = \sqrt{\xi\eta} \sin \varphi.$$

b) Da bismo napisali stacionarnu Schrödinger-ovu jednačinu za elektron u atomu vodonika u paraboliske koordinate treba da nađemo laplasijan u tim koordinatama. Krenemo li da druge izvode Descartes-ovih koordinata izrazimo preko paraboliskih dobićemo jako dugačke izraze koje je teško srediti. Zato nećemo raditi tako nego ćemo iskoristiti formulu za laplasijan u krivolinijskim ortogonalnim koordinatama (q_1, q_2, q_3)

$$\Delta = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left(\frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial}{\partial q_1} \right) + \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{h_3 h_1}{h_2} \frac{\partial}{\partial q_2} \right) + \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial}{\partial q_3} \right) \right),$$

gde su $h_i = |\partial \vec{r} / \partial q_i|$ Lamé-ovi koeficijenti. Kako je

$$\vec{r} = \sqrt{\xi\eta} \cos \varphi \vec{e}_x + \sqrt{\xi\eta} \sin \varphi \vec{e}_y + \frac{\xi - \eta}{2} \vec{e}_z$$

dobijamo da su Lamé-ovi koeficijenti za paraboliske koordinate

$$h_\xi = \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \right| = \left| \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\eta}{\xi}} \cos \varphi \vec{e}_x + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\eta}{\xi}} \sin \varphi \vec{e}_y + \frac{1}{2} \vec{e}_z \right| = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\xi + \eta}{\xi}},$$

i istim postupkom za preostale dve koordinate.

$$h_\eta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\xi + \eta}{\eta}}, \quad h_\varphi = \sqrt{\xi\eta},$$

tako da je laplasijan

$$\Delta = \frac{4}{\xi + \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{4}{\xi + \eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \frac{1}{\xi\eta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Lako se pokazuje da su paraboliske koordinate ortogonalne, odnosno da ortovi paraboliskih koordinata

$$\vec{e}_\xi = \frac{1}{h_\xi} \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi}, \quad \vec{e}_\eta = \frac{1}{h_\eta} \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta}, \quad \vec{e}_\varphi = \frac{1}{h_\varphi} \frac{\partial \vec{r}}{\partial \varphi},$$

čine ortonormiran sistem, što opravdava korišćenje gornje formule za laplasijan. Dakle, Schrödinger-ova jednačina napisana u paraboliskim koordinatama glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{4}{\xi + \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{4}{\xi + \eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \frac{1}{\xi\eta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \psi - \frac{e^2}{\xi + \eta} \psi = E\psi.$$

- c) U ovoj jednačini možemo da razdvojimo promenljive. Ako primetimo da je φ koordinata i u parabolickom i u sfernom koordinatnom sistemu (pa je i φ zavisnost u rešenju ista) možemo pretpostaviti rešenje oblika $\psi(\xi, \eta, \varphi) = X(\xi)Y(\eta)e^{im\varphi}$ čime se jednačina svodi na

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{4}{\xi+\eta} Y(\eta) \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{dX(\xi)}{d\xi} \right) + \frac{4}{\xi+\eta} X(\xi) \frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{dY(\eta)}{d\eta} \right) - \frac{m^2}{\xi\eta} X(\xi)Y(\eta) \right) e^{im\varphi} - \frac{e^2}{\xi+\eta} X(\xi)Y(\eta) e^{im\varphi} = EX(\xi)Y(\eta) e^{im\varphi}.$$

Pomnožimo ovu jednačinu sa $(\xi+\eta)e^{-im\varphi}/(X(\xi)Y(\eta))$ i razdvojimo promenljive da bismo dobili

$$-\frac{2\hbar^2}{m_e} \frac{1}{X(\xi)} \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{dX(\xi)}{d\xi} \right) + \frac{\hbar^2 m^2}{2m_e \xi} - \frac{e^2}{2} - E\xi = \frac{2\hbar^2}{m_e} \frac{1}{Y(\eta)} \frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{dY(\eta)}{d\eta} \right) - \frac{\hbar^2 m^2}{2m_e \eta} + \frac{e^2}{2} + E\eta = C.$$

Jednačine za $X(\xi)$ i $Y(\eta)$ razlikuju samo po znaku konstante C , tako da je dovoljno rešiti jednu od njih, rešenje druge će se lako rekonstruisati. Uzmimo na primer jednačinu za $X(\xi)$ koja glasi

$$-\frac{2\hbar^2}{m_e} \frac{1}{X(\xi)} \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{dX(\xi)}{d\xi} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{m^2}{\xi} - \frac{e^2}{2} - E\xi = C,$$

što ćemo prepisati u obliku

$$\frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{dX(\xi)}{d\xi} \right) - \left(\frac{1}{4} \frac{m^2}{\xi} - \frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{2} + C \right) - \frac{m_e E}{2\hbar^2} \xi \right) X(\xi) = 0.$$

Ako raspišemo prvi član, dobićemo sabirke sa funkcijom $x(\xi)$ i njenim prvim i drugim izvodom. Cilj nam je da ovu jednačinu napišemo u formi neke poznate jednačine. Pokušaćemo da je svedemo na jednačinu iz zadatka 4.29 deo pod **b**), čije rešenje smo našli. Da bismo ostali bez prvog izvoda nepoznate funkcije, razmotrićemo novu nepoznatu funkciju $u(\xi)$ koja zadovoljava $X(\xi) = u(\xi)\xi^\alpha$, pri čemu ćemo izabrati α tako da nemamo prvi izvod u jednačini. Pošto je

$$\frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{d}{d\xi} (u(\xi)\xi^\alpha) \right) = \xi^{\alpha+1} u''(\xi) + \xi^\alpha (1+2\alpha) u'(\xi) + \alpha^2 \xi^{\alpha-1} u(\xi),$$

vidimo da nas izbor $\alpha = -1/2$ rešava neželjenog člana i onda je prvi član

$$\frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{d}{d\xi} \left(\frac{u(\xi)}{\sqrt{\xi}} \right) \right) = \sqrt{\xi} u''(\xi) + \frac{1}{4\xi^{3/2}} u(\xi),$$

pa naša jednačina, uz uvođenje oznake $2m_e E/\hbar^2 = -(\epsilon/2)^2$ i nakon deljenja sa $\sqrt{\xi}$ postaje

$$\frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2} + \left(-\frac{1}{4} \left(\frac{\epsilon}{2} \right)^2 + \frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{2} + C \right) \frac{1}{\xi} - \frac{m^2 - 1}{4} \frac{1}{\xi^2} \right) u(\xi) = 0.$$

Ova jednačina liči na poznatu nam jednačinu ali koeficijent u prvom sabirku u zagradi treba da bude $-1/4$. Da bismo transformisali jednačinu na traženi oblik, reskaliraćemo nezavisno promenljivu $x = \xi\beta$. Onda gornja jednačina, nakon deljenja sa β^2 postaje

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \left(-\frac{1}{4} \left(\frac{\epsilon}{2\beta} \right)^2 + \frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{2} + C \right) \frac{1}{\beta x} - \frac{m^2 - 1}{4} \frac{1}{x^2} \right) u(x) = 0.$$

Vidimo da izbor $\beta = \epsilon/2$ svodi jednačinu na željeni oblik i on je

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{m_e}{\hbar^2 \epsilon} \left(\frac{e^2}{2} + C \right) \frac{1}{x} - \frac{m^2 - 1}{4} \frac{1}{x^2} \right) u(x) = 0.$$

Poredeći sa jednačinom iz zadatka **4.29 b)** vidimo da je

$$m = k, \quad \frac{2n_1 + m + 1}{2} = \frac{m_e}{\hbar^2 \epsilon} \left(\frac{e^2}{2} + C \right).$$

Ovde je n_1 prirodan broj ili 0. Na isti način rešavamo i jednačinu za $Y(\eta)$, koja se od jednačine koju smo rešili razlikuje samo po znaku konstante C . Na kraju dobijamo da će se druga jednačina svesti na traženi oblik ako je

$$m = k, \quad \frac{2n_2 + m + 1}{2} = \frac{m_e}{\hbar^2 \epsilon} \left(\frac{e^2}{2} - C \right).$$

Saberemo li dve jednačine u kojima su uvedeni n_1 i n_2 , dobijamo

$$n_1 + n_2 + m + 1 = \frac{m_e e^2}{\hbar^2 \epsilon}.$$

Uvedimo nov broj $n = n_1 + n_2 + m + 1$ koji je očigledno prirodan i dobijamo da je uslov za energiju

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\epsilon}{2} \right)^2 \Rightarrow E_n = -\frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2},$$

što je poznat izraz za kvatovanje energije elektrona u atomu vodonika. Potražimo sad i talasne funkcije $\psi = X(\xi)Y(\eta)e^{im\varphi}$. Funkciju $X(\xi)$ ćemo prepoznati u nekoliko koraka, kojim smo transformisali jednačine. Dobili smo da je rešenje za $u(x)$

$$u(x) = e^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{m+1}{2}} L_{n_1}^m(x).$$

Pošto je $x = \epsilon\xi/2$ reskalirana koordinata, pri čemu je $\epsilon = 1/(na_0)$ onda je

$$u(\xi) = e^{-\frac{\xi}{4na_0}} \left(\frac{\xi}{2na_0} \right)^{\frac{m+1}{2}} L_{n_1}^m \left(\frac{\xi}{2na_0} \right),$$

dok je

$$X(\xi) = \frac{u(\xi)}{\sqrt{\xi}} = e^{-\frac{\xi}{4na_0}} \left(\frac{\xi}{2na_0} \right)^{\frac{m}{2}} L_{n_1}^m \left(\frac{\xi}{2na_0} \right).$$

Analogno tome je

$$Y(\eta) = e^{-\frac{\eta}{4na_0}} \left(\frac{\eta}{2na_0} \right)^{\frac{m}{2}} L_{n_2}^m \left(\frac{\eta}{2na_0} \right),$$

pa je talasna funkcija

$$\psi_{n_1 n_2 m}(\xi, \eta, \varphi) = C_{n_1 n_2} e^{-\frac{\xi+\eta}{4na_0}} \frac{(\xi\eta)^{\frac{m}{2}}}{(2na_0)^m} L_{n_1}^m \left(\frac{\xi}{2na_0} \right) L_{n_2}^m \left(\frac{\eta}{2na_0} \right) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}.$$

Ovde su $C_{n_1 n_2}$ normalizacione konstante. Za kraj, proverimo još jedan poznat rezultat, izračunajmo degeneraciju energetskog nivoa E_n . Kvantni broj $n = n_1 + n_2 + m + 1$ možemo da realizujemo na n^2 načina jer n_1 uzima n vredosti a za svako od njih n_2 možemo da izaberemo na n načina. Prema tome, nivo E_n je degenerisan n^2 puta.

4.36 Čestica koja se kreće po krugu u ravni ima jedan stepen slobode, označimo ga s φ . Pošto je potencijalna energija $U = 0$, energija je jednaka kinetičkoj energiji:

$$T = \frac{1}{2} m a^2 \dot{\varphi}^2 = \frac{1}{2} I \dot{\varphi}^2,$$

gde smo uveli $I = m a^2$. Generalisani impuls je

$$p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = I \dot{\varphi}$$

i prepoznamo da je on jednak $p_\varphi = L_z$. Dakle, hamiltonijan ove čestice je

$$H = \frac{L_z^2}{2I},$$

i ima isti oblik kao rotator u ravni iz zadatka **4.24 b**) što je trebalo dokazati. Dalje, pošto je $L_z = -i\hbar \partial / \partial \varphi$, Schrödinger-ova jednačina postaje

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \frac{d^2 \psi(\varphi)}{d\varphi^2} = E \psi(\varphi).$$

Nju možemo rešiti kao i u pomenutom zadatku, ali postoji i drugi način da se to uradi.

- a)** Hamiltonijan je kvadratičan po L_z , pa su svojstvena stanja hamiltonijana ista kao i svojstvena stanja z komponente momenta impulsa, a to su funkcije

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}},$$

gde je $m \in \mathbb{Z}$. Svojstvene energije su

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \frac{d^2 \psi_m(\varphi)}{d\varphi^2} = E_m \psi_m(\varphi) \Rightarrow \frac{\hbar^2 m^2}{2I} = E_m.$$

Osnovni nivo ($m = 0$) je nedegenerisan, dok su ostali nivoi ($m \neq 0$) dvostruko degenerisani.

- b)** Hamiltonijan je ovde zadat preko momenta impulsa. Da vidimo kako se menja moment impulsa kad opisujemo česticu u elektromagnetnom polju. Metod minimalne zamene podrazumeva

$$H \rightarrow H - e\Phi, \quad \vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A},$$

tako da se moment impulsa menja sa

$$\vec{L} \rightarrow \vec{r} \times \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) = \vec{L} - \frac{e}{c} \vec{r} \times \vec{A}.$$

U našem konkretnom slučaju, to se svodi na

$$H = \frac{1}{2I} \left(L_z - \frac{e B r^2}{2} \right)^2$$

pa je vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina

$$\frac{1}{2I} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{e B r^2}{2} \right)^2 \psi(\varphi) = E \psi(\varphi).$$

Pošto dodatni član u Schrödinger-ovoj jednačini ne zavisi od φ , rešenje je isto kao kod slobodnog rotatora $\psi_m(\varphi)$ a svojstvena energija je

$$E_m = \frac{1}{2I} \left(m\hbar - \frac{eBr^2}{2c} \right)^2.$$

Primetimo ovde da je spektar drugačiji od slučaja pod **a**) iako je talasna funkcija stanja ista. Ova razlika potiče od postojanja elektromagnetnog polja koje menja hamiltonijan čestice.

4.37 Hamiltonijan čestice u homogenom električnom polju je

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - e\vec{E} \cdot \vec{r}.$$

- a) Vremenski zavisna Schrödinger-ova jednačina čestice u homogenom električnom polju je

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - e\vec{E} \cdot \vec{r} \right) \psi(\vec{r}, t).$$

- b) Ovaj deo zadatka je zapravo demonstracija važenja Ehrenfest-ove teoreme na primeru čestice u električnom polju. Ehrenfest-ovu teoremu smo dokzali u zadatku **2.22**, a na isti način se dokazuje i ovo tvrđenje. Najpre se izračuna izvod po vremenu očekivane vrednosti položaja $\langle \vec{r} \rangle$, pa se pod integralom iskoristi vremenski zavisna Schrödinger-ova jednačina iz prethodnog dela zadatka i njena kompleksno-konjugovana jednačina, urade se parcijalne integracije kao u zadatku **2.22** i dobiće se

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle = \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m}.$$

Potom se odredi izvod po vremenu očekivane vrednosti impulsa

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle &= \frac{d}{dt} \int dV \psi^*(\vec{r}, t) (-i\hbar \nabla) \psi(\vec{r}, t) \\ &= -i\hbar \left(\int dV \frac{\partial \psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} \nabla \psi(\vec{r}, t) + \int dV \psi^*(\vec{r}, t) \nabla \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \right) \\ &= \int dV \left(\cancel{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^*(\vec{r}, t) \nabla \psi(\vec{r}, t)} - e\vec{E} \cdot \vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \nabla \psi(\vec{r}, t) \right. \\ &\quad \left. + \cancel{\frac{\hbar^2}{2m} \psi^*(\vec{r}, t) \nabla (\Delta \psi(\vec{r}, t))} + e\psi^*(\vec{r}, t) \nabla (\vec{E} \cdot \vec{r} \psi(\vec{r}, t)) \right). \end{aligned}$$

Ovi članovi se potiru nakon parcijanih integracija po prostornim koordinatama. Dalje je

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle &= \int dV \left(\cancel{-e\vec{E} \cdot \vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \nabla \psi(\vec{r}, t)} + e\vec{E} \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) + \cancel{\vec{E} \cdot \vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \nabla \psi(\vec{r}, t)} \right) \\ &= e\vec{E} \int dV \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) = e\vec{E}, \end{aligned}$$

pa je na kraju

$$m \frac{d^2 \langle \vec{r} \rangle}{dt^2} = e\vec{E}.$$

4.38 Da bismo dobili zadatu konfiguraciju električnog i magnetnog polja izabraćemo da su skalarni i vektorski potencijal

$$\Phi = -Ex, \quad \vec{A} = Bx\vec{e}_y.$$

Takav izbor zaista daje zadato polje:

$$\vec{E} = -\text{grad}\Phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = E\vec{e}_x, \quad \vec{B} = \text{rot}\vec{A} = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & Bx & 0 \end{vmatrix} = B\vec{e}_z.$$

Hamiltonijan je

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\Phi = \frac{1}{2m} \left(p_x^2 + \left(p_y - \frac{e}{c} Bx \right)^2 + p_z^2 \right) - eEx,$$

pa je vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina

$$\left(\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} Bx \right)^2 - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - eEx \right) \psi(x, y, z) = \mathbb{E} \psi(x, y, z).$$

Ovde smo svojstvenu energiju označili sa \mathbb{E} da bismo je razlikovali od jažvine električnog polja E . Hamiltonijan komutira sa operatorima p_y i p_z . Zato su svojstvena stanja ovih operatora istovremeno i svojstvena stanja hamiltonijana

$$\psi(x, y, z) = F(x) e^{ik_y y} e^{ik_z z}$$

Time smo odredili y i z zavisnost talasne funkcije. Ostalo je da nađemo funkciju $F(x)$. Jednačinu koju ona zadovoljava dobićemo ako rešenje koje trenutno imamo uvrstimo u Schrödinger-ovu jednačinu, tako da dobijamo

$$\left(\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\hbar k_y - \frac{e}{c} Bx \right)^2 + \hbar^2 k_z^2 \right) - eEx \right) F(x) e^{ik_y y} e^{ik_z z} = \mathbb{E} F(x) e^{ik_y y} e^{ik_z z},$$

odnosno

$$\left(\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + \left(\hbar k_y - \frac{e}{c} Bx \right)^2 + \hbar^2 k_z^2 \right) - eEx \right) F(x) = \mathbb{E} F(x).$$

Ovu jednačinu je moguće svesti na Schrödinger-ovu jednačinu harmonijskog oscilatora. Pregrupisavanjem članova ona postaje

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 F(x)}{dx^2} + \frac{1}{2m} \left(\frac{eBx}{c} - \hbar k_y - \frac{mcE}{B} \right)^2 F(x) = \left(\mathbb{E} - \frac{k_z^2 \hbar^2}{2m} + \frac{\hbar k_y c E}{B} + \frac{mc^2 E^2}{2B^2} \right) F(x).$$

Uvedimo novu nezavisno promenljivu

$$\xi = \frac{eB}{c} x - \hbar k_y - \frac{mcE}{B} \Rightarrow \frac{d}{dx} = \frac{eB}{c} \frac{d}{d\xi} \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} = \left(\frac{eB}{c} \right)^2 \frac{d^2}{d\xi^2}$$

preko koje se jednačina prepisuje

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{eB}{c} \right)^2 \frac{d^2}{d\xi^2} F(\xi) + \frac{1}{2m} \xi^2 F(\xi) = \left(\mathbb{E} - \frac{k_z^2 \hbar^2}{2m} + \frac{\hbar k_y c E}{B} + \frac{mc^2 E^2}{2B^2} \right) F(\xi).$$

Schrödinger-ova jednačina harmonijskog oscilatora mase M i sopstvene frekvencije Ω je

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 \psi(\xi)}{d\xi^2} + \frac{1}{2} M \Omega^2 \psi(\xi) = \varepsilon \psi(\xi).$$

Za ovu jednačinu znamo kako izgledaju svojstvena stanja $\psi(\xi)$ i kakav je spektar energije ε . Poredeći je sa jednačinom za $F(\xi)$, dobijamo

$$M = m \left(\frac{c}{eB} \right)^2, \quad \Omega = \frac{eB}{mc}, \quad \varepsilon = \mathbb{E} - \frac{k_z^2 \hbar^2}{2m} + \frac{\hbar k_y c E}{B} + \frac{mc^2 E^2}{2B^2}.$$

Pošto je spektar harmonijskog oscilatora diskretan $\varepsilon_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, onda je

$$\varepsilon_n = \hbar \frac{eB}{mc} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \mathbb{E} - \frac{k_z^2 \hbar^2}{2m} + \frac{\hbar k_y c E}{B} + \frac{mc^2 E^2}{2B^2},$$

tako da je energija čestice

$$\mathbb{E}_{n,k_y,k_z} = \frac{\hbar eB}{mc} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{k_z^2 \hbar^2}{2m} - \frac{\hbar k_y c E}{B} - \frac{mc^2 E^2}{2B^2}.$$

Energija je određena sa tri kvantna broja n , k_y i k_z . Prvi je diskretan $n = 0, 1, 2, \dots$ dok su druga dva kontinualna. Da bismo lakše razumeli ponašanje čestice opisano ovim rešenjem, zgodno je uvesti nekoliko oznaka, koje se prirodno pojavljuju u ovom zadatku

$$v_0 = c \frac{E}{B}, \quad x_0 = \frac{c \hbar k_y}{eB} + \frac{mc^2 E}{eB^2} = \frac{1}{\Omega} \left(\frac{\hbar k_y}{m} + v_0 \right).$$

Uz malo truda lako se dobija da je energija

$$\mathbb{E}_{n,k_y,k_z} = \frac{\hbar eB}{mc} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{k_z^2 \hbar^2}{2m} + \frac{mv_0^2}{2} - eE x_0.$$

Pošto su

$$\frac{M\Omega}{\hbar} = \frac{c}{eB\hbar}, \quad \xi = \frac{eB}{c}(x - x_0),$$

stanje čestice je

$$\psi_{nk_y,k_z}(x, y, z) = AH_n \left(\sqrt{\frac{eB}{c\hbar}}(x - x_0) \right) e^{\frac{eB}{2c\hbar}(x-x_0)^2} e^{ik_y y} e^{ik_z z}.$$

gde je A konstanta normiranja.

4.39 Čestica se kreće u Oxy -ravni. Hamiltonijan koji određuje kretanje čestice je

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_x - \frac{e}{c} A_x \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(p_y - \frac{e}{c} A_y \right)^2.$$

a) Ako izaberemo da je vektorski potencijal $\vec{A} = (-By, 0, 0)$, dobićemo da je magnetno polje zaista usmereno duž z -ose

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A} = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ -By & 0 & 0 \end{vmatrix} = B\vec{e}_z.$$

Schrödinger-ova jednačina za ovaj sistem je

$$\frac{1}{2m} \left(\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} By \right)^2 - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) = E\psi(x, y),$$

i njeno rešenje ćemo potražiti u obliku $\psi(x, y) = e^{ik_x x} Y(y)$ (ravan talas $X(x) = e^{ik_x x}$ je rešenje x zavisnosti gornje jednačine, jer se x koordinata pojavljuje samo kroz izvod). Kad

uvrstimo pretpostavljeno rešenje i diferenciramo po x , nakon toga možemo da podelimo jednačinu sa $e^{ik_x x}$ čime dobijamo diferencijalnu jednačinu za napoznatu funkciju $Y(y)$

$$\frac{1}{2m} \left(\left(\hbar k_x + \frac{e}{c} B y \right)^2 - \hbar^2 \frac{d^2}{dy^2} \right) Y(y) = E Y(y),$$

a to je Schrödinger-ova jednačina harmonijskog oscilatora, jer imamo drugi izvod i kvadratičan član po koordinati. Da bismo identifikovali parametre oscilatora, uvešćemo novu koordinatu

$$\zeta = \hbar k_x + \frac{e}{c} B y \Rightarrow \frac{d^2}{dy^2} = \left(\frac{eB}{c} \right)^2 \frac{d^2}{d\zeta^2},$$

tako da je gornja jednačina zapravo

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{eB}{c} \right)^2 \frac{d^2}{d\zeta^2} + \frac{1}{2m} \zeta^2 \right) Y(\zeta) = E Y(\zeta),$$

a to je harmonijski oscilator mase i ugaone frekvencije

$$M = m \left(\frac{c}{eB} \right)^2, \quad \Omega = \frac{eB}{mc}.$$

Kad znamo frekvenciju, poznata nam je i energija oscilatora:

$$E_n = \hbar \Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar e B}{mc} \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Energija ukazuje da se čestica ponaša kao jednodimenzioni harmonijski oscilator, odnosno da osciluje u ravni normalnoj na polje frekvencijom Ω . Pogledamo sad talasnu funkciju. Prepoznajući najpre ζ zavisnost, posredno preko nje se dobija i y zavisnost talasne funkcije pa je

$$\psi_n(x, y) = C e^{ik_x x} H_n \left(\sqrt{\frac{eB}{\hbar c}} \left(y - \frac{\hbar k_y c}{eB} \right) \right) e^{-\frac{eB}{2\hbar c} \left(y - \frac{\hbar k_y c}{eB} \right)^2}$$

Posmatrajući ovu talasnu funkciju deluje kao da čestica osciluje ciklotronskom frekvencijom u pravcu y -ose, a da se duž x -ose kreće slobodno. Ipak, to nije tako, jer je duž x -ose generalisani impuls sastavljen od kinetičkog impulsa i impulsa polja, dok duž y -ose imamo samo kinetički impuls. Zato se duž x -ose čestica ne kreće slobodno, mada je rešenje oblika $e^{ik_x x}$ već se ispostavlja da i tu osciluje.

- b)** U prethodnom delu zadatka smo dobili oscilator koji je duž dva pravca opisan različito, mada je kretanje u tim pravcima isto. Sad ćemo stvari posmatrati u šimetričnom gejdžu"u kome je potencijal polja $\vec{A} = (-By/2, Bx/2, 0)$. Ovaj izbor će omogućiti da fizičku situaciju opišemo simetrično. Najpre ćemo proveriti da li ovaj potencijal opisuje isto polje. Lako vidimo da je

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A} = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ -\frac{1}{2}By & \frac{1}{2}Bx & 0 \end{vmatrix} = \frac{1}{2}B\vec{e}_z + \frac{1}{2}B\vec{e}_z = B\vec{e}_z$$

što znači da je izbor vektorskog potencijala dobar.

c) U simetričnom gejdžu hamiltonijan je

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_x + \frac{eB}{2c} y \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(p_y - \frac{eB}{2c} x \right)^2,$$

pa je vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina

$$\frac{1}{2m} \left(\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \frac{eB}{2c} y \right)^2 + \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{eB}{2c} x \right)^2 \right) \psi(x, y) = E\psi(x, y),$$

d) Skaliranje

$$X = \sqrt{\frac{eB}{\hbar c}} x, \quad Y = \sqrt{\frac{eB}{\hbar c}} y,$$

prevodi Schrödinger-ovu jednačinu u bezdimenzionu formu. Naime, pri ovoj transformaciji izvodi se menjaju kao

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sqrt{\frac{eB}{\hbar c}} \frac{\partial}{\partial X}, \quad \frac{\partial}{\partial y} = \sqrt{\frac{eB}{\hbar c}} \frac{\partial}{\partial Y}$$

tako da Schrödinger-ova jednačina postaje

$$\frac{1}{2} \left(\left(-i \frac{\partial}{\partial X} + \frac{1}{2} Y \right)^2 + \left(-i \frac{\partial}{\partial Y} - \frac{1}{2} X \right)^2 \right) \psi(X, Y) = \epsilon \psi(X, Y),$$

gde je

$$\epsilon = \frac{2mc}{\hbar eB} E$$

e) Kompleksne koordinate ćemo uvesti na sledeći način

$$z = X + iY, \quad z^* = X - iY,$$

pa je onda

$$X = \frac{z + z^*}{2}, \quad Y = \frac{z - z^*}{2i}.$$

Dalje je

$$\frac{\partial}{\partial z} f = \frac{\partial f}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial z} = \frac{\partial f}{\partial X} \frac{1}{2} + \frac{1}{2i} \frac{\partial f}{\partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial X} - i \frac{\partial}{\partial Y} \right) f.$$

Na isti način se nalazi kako se računa parcijalni izvod po kompleksno konjugovanoj koordinati z^* i konačno se dobija da su

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial X} - i \frac{\partial}{\partial Y} \right), \quad \frac{\partial}{\partial z^*} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial X} + i \frac{\partial}{\partial Y} \right).$$

f) Izračunajmo najpre

$$\begin{aligned} \left[z, \frac{\partial}{\partial z} \right] f &= z \frac{\partial}{\partial z} f - \frac{\partial}{\partial z} (zf) \\ &= (X + iY) \frac{1}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial X} - i \frac{\partial f}{\partial Y} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial X} - i \frac{\partial}{\partial Y} \right) (Xf + iYf) \\ &= \frac{1}{2} \left(X \frac{\partial f}{\partial X} - iX \frac{\partial f}{\partial Y} + iY \frac{\partial f}{\partial X} + Y \frac{\partial f}{\partial Y} \right) \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{2} \left(f + X \frac{\partial f}{\partial X} + iY \frac{\partial f}{\partial X} - iX \frac{\partial f}{\partial Y} + f + Y \frac{\partial f}{\partial Y} \right) = -f.$$

Na isti način se pokazuje da je komutator $[z^*, \partial_{z^*}] = -1$. Pogledajmo šta se dobija kad se potraži komutator $[z, \partial_{z^*}]$ (istovetno bi se dobilo i za $[z^*, \partial_z]$):

$$\begin{aligned} \left[z, \frac{\partial}{\partial z^*} \right] f &= z \frac{\partial}{\partial z^*} f - \frac{\partial}{\partial z^*} (zf) \\ &= (X + iY) \frac{1}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial X} + i \frac{\partial f}{\partial Y} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial X} + i \frac{\partial}{\partial Y} \right) (Xf + iYf) \\ &= \frac{1}{2} \left(X \frac{\partial f}{\partial X} + iX \frac{\partial f}{\partial Y} + iY \frac{\partial f}{\partial X} - Y \frac{\partial f}{\partial Y} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left(f + X \frac{\partial f}{\partial X} + iY \frac{\partial f}{\partial X} + iX \frac{\partial f}{\partial Y} - f - Y \frac{\partial f}{\partial Y} \right) = 0. \end{aligned}$$

Time smo pokazali da važe komutacione relacije

$$\left[z, \frac{\partial}{\partial z} \right] = \left[z^*, \frac{\partial}{\partial z^*} \right] = -1, \quad \left[z, \frac{\partial}{\partial z^*} \right] = \left[z^*, \frac{\partial}{\partial z} \right] = 0.$$

g) Hamiltonijan iz **d)** dela zadatka možemo da napišemo preko kompleksnih koordinata i njihovih izvoda

$$H = \frac{1}{2} \left(-i \frac{\partial}{\partial z} - i \frac{\partial}{\partial z^*} + \frac{z - z^*}{4i} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial z^*} - \frac{\partial}{\partial z} - \frac{z + z^*}{4} \right)^2.$$

Pažljivim, pravolinijskim računom može se pokazati da je ovaj izraz jednak

$$H = -2 \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial z^*} + \frac{1}{4} \left(z \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} z - z^* \frac{\partial}{\partial z^*} - \frac{\partial}{\partial z^*} z^* \right) + \frac{1}{8} z z^*.$$

Ako primetimo da su

$$\frac{\partial}{\partial z} z = \left[\frac{\partial}{\partial z}, z \right] + z \frac{\partial}{\partial z} = 1 + z \frac{\partial}{\partial z}, \quad z^* \frac{\partial}{\partial z^*} = \left[z^*, \frac{\partial}{\partial z^*} \right] + \frac{\partial}{\partial z^*} z^* = -1 + \frac{\partial}{\partial z^*} z^*$$

gonji izraz možemo da napišemo u obliku

$$H = -2 \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial z^*} + \frac{1}{2} \left(z \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z^*} z^* \right) + \frac{1}{8} z z^* + \frac{1}{2} = 2 \left(-\frac{\partial}{\partial z^*} + \frac{z}{4} \right) \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{z^*}{4} \right) + \frac{1}{2}.$$

pa su kreacioni i anihilacioni operatori

$$a^\dagger = \sqrt{2} \left(-\frac{\partial}{\partial z^*} + \frac{z}{4} \right), \quad a = \sqrt{2} \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{z^*}{4} \right).$$

Komutator lako nalazimo

$$[a, a^\dagger] = 2 \left[\frac{\partial}{\partial z} + \frac{z^*}{4}, -\frac{\partial}{\partial z^*} + \frac{z}{4} \right] = 2 \left(\frac{1}{4} \left[\frac{\partial}{\partial z}, z \right] - \frac{1}{4} \left[z^*, \frac{\partial}{\partial z^*} \right] \right) = 1.$$

Ovim smo pokazali da hamiltonijan u simetričnom gejdžu može napisati u obliku

$$H = a^\dagger a + \frac{1}{2}$$

pa zato ima spektar harmonijskog oscilatora, kao i za gejdž izbor koji smo izvršili u delu pod **a**). Ipak, ovde su stanja drugačija (razlikuju se do na gejdž transformaciju, koja je neopersvabilna). Osnovno stanje možemo da nađemo iz uslova

$$a|\psi_0\rangle = 0,$$

što se svodi na diferencijalnu jednačinu

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{z^*}{4}\right)\psi_0 = 0, \Rightarrow \psi_0 = C e^{-\frac{zz^*}{4}},$$

a to je rešenje Gauss-ovog tipa.

h) Razmotrimo operatore

$$b^\dagger = \sqrt{2}\left(-\frac{\partial}{\partial z} + \frac{z^*}{4}\right), \quad b = \sqrt{2}\left(\frac{\partial}{\partial z^*} + \frac{z}{4}\right).$$

Lako se pokazuje da je njihov komutator $[b, b^\dagger] = 1$. Proverimo čemu je jednak komutator a sa b

$$[a, b] = 2 \left[\frac{\partial}{\partial z} + \frac{z^*}{4}, \frac{\partial}{\partial z^*} + \frac{z}{4} \right] = 2 \left(\underbrace{\frac{1}{4} \left[\frac{\partial}{\partial z}, z \right]}_1 + \underbrace{\frac{1}{4} \left[z^*, \frac{\partial}{\partial z^*} \right]}_{-1} \right) = 0.$$

Slično se pokazuje i da su ostali komutatori kreacionih a^\dagger ili anihilacionih a sa b ili b^\dagger jednaki nula.

Potražimo sad kako izgleda operator L_z napisan preko kreacionih i anihilacionih operatora. Najpre vidimo da je napisan preko skaliranih koordinata X i Y

$$L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \left(X \frac{\partial}{\partial Y} - Y \frac{\partial}{\partial X} \right).$$

Ovaj operator se može napisati i preko z i z^*

$$L_z = \hbar \left(\frac{z+z^*}{2} \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z^*} \right) + \frac{z-z^*}{2} \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z^*} \right) \right) = \hbar \left(z \frac{\partial}{\partial z} - z^* \frac{\partial}{\partial z^*} \right).$$

Ovaj izraz ima jednostavan oblik, ali ćemo ga ipak malo transformisati, napisaćemo ga preko kreacionih i anihilacionih operatora. Da bismo prepoznali koja kombinacija kreacionih i anihilacionih operatora se javlja u L_z izračunajmo čemu je jednako

$$\begin{aligned} a^\dagger a - b^\dagger b &= 2 \left(-\frac{\partial}{\partial z^*} + \frac{z}{4} \right) \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{z^*}{4} \right) - 2 \left(-\frac{\partial}{\partial z} + \frac{z^*}{4} \right) \left(\frac{\partial}{\partial z^*} + \frac{z}{4} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(z \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} z - z^* \frac{\partial}{\partial z^*} - \frac{\partial}{\partial z^*} z^* \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(z \frac{\partial}{\partial z} + \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial z}, z \right]}_1 + z \frac{\partial}{\partial z} - z^* \frac{\partial}{\partial z^*} - \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial z^*}, z^* \right]}_1 - z^* \frac{\partial}{\partial z^*} \right) \\ &= z \frac{\partial}{\partial z} - z^* \frac{\partial}{\partial z^*} \end{aligned}$$

pa vidimo da je

$$L_z = \hbar(a^\dagger a - b^\dagger b).$$

SIMETRIJE

5.1 Pogledamo kako jednačina

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \frac{4\pi}{c} j^\nu$$

izgleda ako uzmemo da je $\nu = 0$. Tada dobijamo

$$\partial_\mu F^{\mu 0} = \frac{4\pi}{c} j^0 \Rightarrow \partial_i F^{i0} = \frac{4\pi}{c} j^0.$$

Ovaj izraz je kovarijantan i treba da vodimo računa o tome koji indeks je gornji a koji je donji. Spuštanje/podizanje prostornog indeksa pravi jedan znak – ispred izraza, dok promena mesta vremenskog indeksa ne dovodi do bilo kakve promene u izrazu. Zato je

$$F^{i0} = \frac{\partial A^0}{\partial x_i} - \frac{\partial A^i}{\partial x_0} = \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} + \frac{1}{c} \frac{\partial A_i}{\partial t} = -E_i,$$

pa je leva strana polazne jednačine

$$\partial_i F^{i0} = \frac{\partial F^{i0}}{\partial x^i} = -\frac{\partial F^{i0}}{\partial x_i} = \frac{\partial E_i}{\partial x_i} = \text{div } \vec{E}.$$

Pošto je nulta komponenta kvadrivektora u Gauss-ovom sistemu $j^0 = c\rho$, dobijamo da se Maxwell-ove jednačine u kovarijantnoj formi za $\nu = 0$ svode na Gauss-ov zakon

$$\partial_\mu F^{\mu 0} = \frac{4\pi}{c} j^0 \Rightarrow \text{div } \vec{E} = 4\pi\rho. \checkmark$$

Sad ćemo da pokažemo da se za $\nu = k$ dobija Ampere-ov zakon. Tada je

$$\partial_\mu F^{\mu k} = \frac{4\pi}{c} j^k \Rightarrow \partial_0 F^{0k} + \partial_i F^{ik} = \frac{4\pi}{c} j^k$$

Prvi sabirak s leve strane je

$$\partial_0 F^{0k} = \frac{1}{c} \frac{\partial F^{0k}}{\partial t} = \frac{1}{c} \frac{\partial E_k}{\partial t},$$

dok se drugi može videti i na sledeći način

$$\partial_i F^{ik} = \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial A^k}{\partial x_i} - \frac{\partial A^i}{\partial x_k} \right) = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(-\frac{\partial A_k}{\partial x_i} + \frac{\partial A_i}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial A_k}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_k} \right) = -\varepsilon_{ijk} \frac{\partial B_j}{\partial x_i}.$$

Poslednji korak se dobija na sledeći način: pošto je

$$B_j = \varepsilon_{jmn} \frac{\partial A_n}{\partial x_m},$$

množeći ovu jednačinu sa ε_{jki} dobijamo

$$\varepsilon_{jki} B_j = \varepsilon_{jki} \varepsilon_{jmn} \frac{\partial A_n}{\partial x_m} = (\delta_{km} \delta_{in} - \delta_{im} \delta_{kn}) \frac{\partial A_n}{\partial x_m} = \frac{\partial A_i}{\partial x_k} - \frac{\partial A_k}{\partial x_i},$$

pa čitavu jednačinu možemo prepisati u obliku

$$\frac{1}{c} \frac{\partial E_k}{\partial t} - \varepsilon_{ijk} \frac{\partial B_j}{\partial x_i} = -\frac{4\pi}{c} j_k \Rightarrow \varepsilon_{ijk} \frac{\partial B_j}{\partial x_i} - \frac{1}{c} \frac{\partial E_k}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} j_k,$$

što predstavlja k -tu komponentu jednačine (1.24).

5.2 Galilei-jeva grupa je grupa transformacija euklidskog prostora koja sadrži rotacije R i translacije \vec{a} . Pri delovanju Galileo-jeve grupe, vektor \vec{r} se transformiše u

$$\vec{r} \xrightarrow{R, \vec{a}} \vec{r}' = R\vec{r} + \vec{a}$$

gde je R specijalna ortogonalna 3×3 matrica i \vec{a} vektor translacije. Ova transformacija se može videti i preko delovanja 4×4 matrice na sledeći način:

$$\begin{pmatrix} \vec{r}' \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R & \vec{a} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{r} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R\vec{r} + \vec{a} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Razmotrimo dve Galileo-eve transformacije i pogledajmo kako one deluju:

$$\begin{pmatrix} R_2 & \vec{a}_2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1 & \vec{a}_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_2 R_1 & R_2 \vec{a}_1 + \vec{a}_2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Vidimo da je dobijena matrica oblika Galileo-eve transformacije, tako da one čine grupu. Nova transformacija predstavlja rotaciju opisanu matricom $R_2 R_1$ i translaciju za $R_2 \vec{a}_1 + \vec{a}_2$, a to je način kako se kombinuju dve Galileo-eve transformacije, jer je

$$\vec{r} \xrightarrow{R_1, \vec{a}_1} R_1 \vec{r} + \vec{a}_1 \xrightarrow{R_2, \vec{a}_2} R_2 (R_1 \vec{r} + \vec{a}_1) + \vec{a}_2 = R_2 R_1 \vec{r} + R_2 \vec{a}_1 + \vec{a}_2.$$

5.3 Potencijalna energija je parna funkcija $V(-x) = V(x)$. Ako na Schrödinger-ovoj jednačini

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

Pri prostornoj inverziji $x \rightarrow -x$, talasna funkcija se menja $\psi(x) \rightarrow \psi(-x)$, prvi izvod postaje $d/dx \rightarrow -d/dx$, pa se drugi izvod ne menja $d^2/dx^2 \rightarrow d^2/dx^2$, kao ni potencijalna energija $V(x) \rightarrow V(-x) = V(x)$ tako da Schrödinger-ova jednačina postaje

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

Ovo znači da i funkcija $\psi(-x)$ takođe zadovoljava Schrödinger-ovu jednačinu, pa se $\psi(x)$ i $\psi(-x)$ mogu razlikovati do na multiplikativni faktor

$$\psi(-x) = a \psi(x).$$

Ako izvršimo prostornu inverziju gornje jednačine, dobićemo

$$\psi(-(-x)) = \psi(x) = \underbrace{a \psi(-x)}_{a \psi(x)} = a^2 \psi(x) \Rightarrow a^2 = 1 \Rightarrow a = \pm 1.$$

Prema tome, multiplikativni faktor može da bude $a = 1$, što znači da je talasna funkcija $\psi(-x) = \psi(x)$ parna, ili je $a = -1$, a u tom slučaju je $\psi(-x) = -\psi(x)$ talasna funkcija neparna.

5.4 U impulsnoj reprezentaciji talasna funkcija na koju deluje operator parnosti je

$$\langle p|\Pi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{\langle p|x\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}px}} \underbrace{\langle x|\Pi|\psi\rangle}_{\langle -x|} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar}px} \psi(-x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{i}{\hbar}px} \psi(x).$$

Da bismo dobili Fourier-ovu transformaciju u poslednjem integralu je potrebno da zamenimo $p \rightarrow -p$ pa je konačno

$$\langle p|\Pi|\psi\rangle = \Pi\tilde{\psi}(p) = \tilde{\psi}(-p).$$

5.5 U jednačini (5.26) videli smo da je

$$\Pi\hat{r}\Pi = -\hat{r}$$

Pogledamo kako parnost deluje na svojstveno stanje impulsa $|\vec{p}\rangle$ a onda i na opsertaor impulsa \hat{p} . Pošto je $\Pi|\vec{r}\rangle = |-\vec{r}\rangle$ onda je

$$\langle \vec{p}|\Pi|\vec{r}\rangle = \langle \vec{p}|- \vec{r}\rangle = \langle -\vec{p}|\vec{r}\rangle.$$

Adjungovanjem ove jednačine (koristeći da je $\Pi^\dagger = \Pi$) dobijamo

$$\langle \vec{r}|\Pi|\vec{p}\rangle = \langle \vec{r}|- \vec{p}\rangle \Rightarrow \Pi|\vec{p}\rangle = |-\vec{p}\rangle.$$

Sad je lako videti kakav je odnos Π i operatora \hat{p} :

$$\Pi\hat{p}\Pi|\vec{p}\rangle = \Pi\hat{p}|-\vec{p}\rangle = \Pi(-\vec{p})|-\vec{p}\rangle = -\vec{p}\Pi|-\vec{p}\rangle = -\vec{p}|\vec{p}\rangle = -\hat{p}|\vec{p}\rangle \Rightarrow \Pi\hat{p}\Pi = -\hat{p}.$$

Operator momenta impulsa je definisan preko vektorskog proizvoda operatora koordinate i impulsa pa je

$$\Pi\hat{L}\Pi = \Pi\hat{r} \times \hat{p}\Pi = \Pi\hat{r}\Pi \times \Pi\hat{p}\Pi = (-\hat{r}) \times (-\hat{p}) = \hat{r} \times \hat{p} = \hat{L}.$$

Ovde smo iskoristili da je $\Pi^2 = I$. Ako pomnožimo gornju relaciju sleva sa Π dobijamo

$$\hat{L}\Pi = \Pi\hat{L},$$

što znači da parnost komutira sa momentom impulsa. Moment impulsa je primer pseudo-vektora (vektor koji komutira sa opsertorom parnosti). Pošto je spin \hat{s} forma momenta impulsa, onda je i on pseudo-vektor pa komutira sa Π . Sličnio je i sa ukupnim momentom impulsa $\hat{J} = \hat{L} + \hat{s}$.

5.6 Da bismo odredili kako se sferni harmonik $Y_l^m(\theta, \varphi)$ transformiše pri prostornoj inverziji $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ pogledajmo najpre kako se pri toj transformaciji menjaju uglovi. Lako se vidi da su azimutalni i polarni ugao vektora $-\vec{r}$

$$\theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi,$$

pa nakon prostorne inverzije sferni harmonik prelazi u

$$\begin{aligned} Y_l^m(\theta, \varphi) &= N_l^m P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \rightarrow Y_l^m(\pi - \theta, \varphi + \pi) = N_l^m P_l^m(\cos(\pi - \theta)) e^{im(\varphi + \pi)} \\ &= N_l^m P_l^m(-\cos\theta) e^{im\varphi} e^{im\pi}. \end{aligned}$$

Parnost asociranih Legendre-ovih polinoma se nalazi iz njihove definicije (videti zadatak 4.17). Pošto je za $m \geq 0$

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

vidimo da je

$$P_l^m(-x) = (-1)^{l+m} P_l^m(x).$$

Za $m < 0$ imamo da je

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x),$$

tako da je parnost asociarane Legendre-ove funkcije ista za $-m$ kao i m . To nas dovodi do zaključka da je u opštem slučaju

$$P_l^m(-x) = (-1)^{l+|m|} P_l^m(x).$$

Dalje, pošto je $e^{im\pi} = (-1)^m$, konačno nalazimo

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \rightarrow N_l^m (-1)^{l+|m|} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} (-1)^m = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi),$$

tako da parnost sfernog harmonika zavisi samo od kvantnog broja l . Ovo se može pokazati na još jedan relativno jednostavan način. Naime, sferni harmonik maksimalnog momenta impulsa izgleda krajnje jednostavno $Y_l^l(\theta, \varphi) = N_l \sin^l \theta$ i pri inverziji prostora prelazi

$$Y_l^l(\theta, \varphi) \rightarrow \Pi Y_l^l(\theta, \varphi) = Y_l^l\left(\frac{\pi}{2} - \theta, \varphi + \pi\right) = N_l \sin^l\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) = (-1)^l N_l \sin^l \theta = (-1)^l Y_l^l(\theta, \varphi).$$

Ostali sferni harmonici imaju istu parnost, jer moment impulsa komutira sa Π . Tako je na primer

$$\begin{aligned} \Pi Y_l^{l-1}(\theta, \varphi) &= \Pi L_- Y_l^l(\theta, \varphi) = \Pi(L_x - iL_y) Y_l^l(\theta, \varphi) = (L_x - iL_y) \Pi Y_l^l(\theta, \varphi) \\ &= (-1)^l (L_x - iL_y) Y_l^l(\theta, \varphi) = (-1)^l Y_l^{l-1}(\theta, \varphi). \end{aligned}$$

Analogno bi se pokazalo da parnost ostalih sfernih harmonika Y_l^m ne zavisi od m i da je $(-1)^l$.

5.7 Kreacioni operator za harmonijski oscilator napisan preko operatora impulsa p i koordinate x je

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-ip + m\omega x).$$

U prethodnim zadacima videli smo kako parnost deluje na operatore koordinate i impulsa

$$\Pi x \Pi = -x, \quad \Pi p \Pi = -p,$$

pa je onda

$$\Pi a^\dagger \Pi = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-i\Pi p \Pi + m\omega \Pi x \Pi) = -\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-ip + m\omega x) = -a^\dagger.$$

Dakle, kreacioni operator i operator parnosti antikomutiraju

$$\Pi a^\dagger = -a^\dagger \Pi.$$

Zbog toga dva susedna stanja imaju različite parnosti. Neka je η_n parnost stanja $|n\rangle$. Onda je parnost stanja $|n+1\rangle$:

$$\Pi |n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \Pi a^\dagger |n\rangle = -\frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger \Pi |n\rangle = -\frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger \eta_n |n\rangle = -\eta_n |n+1\rangle$$

Odnosno, imamo da je $\eta_{n+1} = -\eta_n$. Pošto je talasna funkcija osnovnog stanja parna, onda je $\eta_0 = 1$, tako da je parnost stanja $|n\rangle$ jednaka $(-1)^n$.

5.8 U sistemu centra mase dve identične čestice, relativni položaj je opisan operatorom

$$\hat{r} = \hat{r}_2 - \hat{r}_1.$$

Delovanje operatora prostorne inverzije se svodi na

$$\hat{r} \rightarrow \Pi \hat{r} = -\hat{r} = \hat{r}_1 - \hat{r}_2,$$

a to je operator izmene ove dve čestice.

5.9 Odredimo kako $U(\alpha, \beta)$ deluje na operator koordinate x i impulsa p . Koristeći Baker–Campbell–Hausdorff-ovu formulu imamo

$$U^{-1} x U = e^{iM} x e^{-iM} = x + [iM, x] + \frac{1}{2} [iM, [iM, x]] + \frac{1}{3!} [iM, [iM, [iM, x]]] + \dots$$

Prvi komutator je

$$[iM, x] = i[\alpha^2 x^2 + \beta^2 p^2, x] = i\beta^2 [p^2, x] = 2\beta^2 \hbar p.$$

Drugi komutator nalazimo koristeći prvi

$$[iM, [iM, x]] = i[\alpha^2 x^2 + \beta^2 p^2, 2\beta^2 \hbar p] = -4\alpha^2 \beta^2 \hbar^2 x$$

Naredni komutator je do na konstantu isti kao prvi, tako da prepoznamo način kako se dobijaju ostali sabirci

$$\begin{aligned} U^{-1} x U &= x + 2\beta^2 \hbar p - \frac{1}{2!} 4\alpha^2 \beta^2 \hbar^2 x - \frac{1}{3!} 8\alpha^2 \beta^4 \hbar^3 p + \dots \\ &= \left(1 - \frac{1}{2!} (2\alpha\beta\hbar)^2 + \dots\right) x + \frac{\beta}{\alpha} \left(2\alpha\beta\hbar - \frac{1}{3!} (2\alpha\beta\hbar)^3 + \dots\right) p \\ &= x \cos(2\alpha\beta\hbar) + \frac{\beta}{\alpha} p \sin(2\alpha\beta\hbar). \end{aligned}$$

Na isti način nalazimo da je

$$U^{-1} p U = p \cos(2\alpha\beta\hbar) + \frac{\alpha}{\beta} x \sin(2\alpha\beta\hbar)$$

Iz ove dve jednačine vidimo da će U delovati kao parnost ako je $2\alpha\beta\hbar = \pi$ a dimenzija od $\alpha/\beta = [p]/[x]$. Ova dva zahteva imaju rešenje

$$\alpha^2 = \frac{\pi m \omega}{2\hbar}, \quad \beta^2 = \frac{\pi}{2\hbar m \omega},$$

tako da je

$$M = \frac{\pi m \omega}{2\hbar} x^2 + \frac{\pi}{2\hbar m \omega} p^2,$$

što se može napisati i preko hamiltonijana harmonijskog oscilatora

$$M = \frac{\pi}{\hbar \omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) = \frac{\pi}{\hbar \omega} H.$$

Stoga operator U možemo napisati u obliku

$$U = e^{-\frac{i\pi}{\hbar \omega} H}.$$

Ova reprezentacija je dvoznačna $U^2 \neq I$, iako je U unitaran operator.

5.10 Pri translacijama za vektor \vec{a} prostorne koordinate čestica \vec{r}_i se menjaju

$$\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}'_i = \vec{r}_i + \vec{a}$$

dok impuls ostaje nepromenjen $\vec{p}_i \rightarrow \vec{p}'_i = \vec{p}_i$. To se lako pokazuje jer je

$$\vec{p}'_i = i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x'_i} \vec{e}'_x + \frac{\partial}{\partial y'_i} \vec{e}'_y + \frac{\partial}{\partial z'_i} \vec{e}'_z \right)$$

pa iz

$$\frac{\partial}{\partial x'_i} = \underbrace{\frac{\partial x_i}{\partial x'_i}}_1 \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}$$

i $\vec{e}'_x = \vec{e}_x$ (te analogno za ostale komponente) dobijamo invarijantnost impulsa pri translaciji. Zbog toga je i kinetička energija pojedinih čestica invarijantna na translacije, a onda je i ukupna kinetička energija nepromenjena pri translacijama. I rastojanje između dve čestice se ne menja pri translacijama $|\vec{r}_i - \vec{r}_k| \rightarrow |\vec{r}'_i - \vec{r}'_k| = |\vec{r}_i - \vec{r}_k|$ pa je i potencijalna energija invarijantna na ovu transformaciju. Dakle, hamiltonijan je invarijantan na translacije. Zbog toga je ukupan impuls sistema

$$\vec{P} = \sum_i \vec{p}_i.$$

održana veličina. To možemo proveriti i tako što ćemo pokazati da je komutator $[H, \vec{P}] = 0$. To se relativno jednostavno pokazuje

$$[H, \vec{P}] = \left[\sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i \neq k} V_{ik}(|\vec{r}_i - \vec{r}_k|), \sum_j \vec{p}_j \right] = \sum_{i,j} \frac{1}{2m_i} [\vec{p}_i^2, \vec{p}_j] + \sum_{i \neq k, j} [V_{ik}(|\vec{r}_i - \vec{r}_k|), \vec{p}_j].$$

Prva suma je očigledno nula, jer impulsi međusobno komutiraju. Izračunajmo drugi komutator. Ako je $f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n)$ probna funkcija onda imamo

$$\sum_{i \neq k, j} [V_{ik}(|\vec{r}_i - \vec{r}_k|), \vec{p}_j] f = \sum_{i \neq k, j} [V_{ik}(|\vec{r}_i - \vec{r}_k|), i\hbar \nabla_j] f,$$

gde je

$$\nabla_j = \frac{\partial}{\partial x_j} \vec{e}_x + \frac{\partial}{\partial y_j} \vec{e}_y + \frac{\partial}{\partial z_j} \vec{e}_z.$$

Dalje je

$$\begin{aligned} \sum_{i \neq k, j} [V_{ik}(|\vec{r}_i - \vec{r}_k|), \vec{p}_j] f &= i\hbar \sum_{i \neq k, j} V_{ik}(|\vec{r}_i - \vec{r}_k|) (\nabla_j f) - \nabla_j (V_{ik}(|\vec{r}_i - \vec{r}_k|) f) \\ &= i\hbar \sum_{i \neq k, j} \overline{V_{ik}(|\vec{r}_i - \vec{r}_k|)} (\nabla_j f) - (\nabla_j V_{ik}(|\vec{r}_i - \vec{r}_k|)) f \\ &\quad - \overline{V_{ik}(|\vec{r}_i - \vec{r}_k|)} (\nabla_j f) \\ &= -i\hbar \sum_{i \neq k} (\nabla_i V_{ik}(|\vec{r}_i - \vec{r}_k|)) f - (\nabla_k V_{ik}(|\vec{r}_i - \vec{r}_k|)) f \\ &= 0, \end{aligned}$$

tako da hamiltonijan zaista komutira sa ukupnim impulsom sistema.

5.11 Operator $U(\theta) = \exp(-i\theta L_y/\hbar)$ reprezentuje rotaciju oko y -ose za ugao θ . Da vidimo kako ovaj operator deluje na opservable x , p_z i $H = p^2/(2m) + V(r)$.

a) Baker–Campbell–Hausdorff-ova formula primenjena na ovom slučaju daje

$$\begin{aligned} UxU^\dagger &= e^{-\frac{i}{\hbar}\theta L_y} x e^{\frac{i}{\hbar}\theta L_y} \\ &= x - \frac{i}{\hbar}\theta [L_y, x] + \frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar}\theta\right)^2 [L_y, [L_y, x]] + \frac{1}{3!} \left(-\frac{i}{\hbar}\theta\right)^3 [L_y, [L_y, [L_y, x]]] + \dots \end{aligned}$$

Pošto su

$$[L_y, x] = [zp_x - xp_z, x] = z[p_x, x] = -i\hbar z,$$

$$[L_y, z] = [zp_x - xp_z, z] = -x[p_z, z] = i\hbar x,$$

dalje nastavljamo i dobijamo

$$\begin{aligned} UxU^\dagger &= x - \theta z - \frac{1}{2}\theta^2 x + \frac{1}{3!}\theta^3 z + \dots \\ &= x \left(1 - \frac{1}{2}\theta^2 + \dots\right) + z \left(\theta - \frac{1}{3!}\theta^3 + \dots\right) \\ &= x \cos \theta + z \sin \theta. \end{aligned}$$

Ovde prepoznamo rotaciju za ugao θ oko y -ose.

b) Istovetnim postupkom koji smo primenili u prethodnom delu zadatka dobijamo

$$Up_zU^\dagger = p_z \cos \theta - p_x \sin \theta.$$

c) Ovde prepoznamo da je opservabla na koju deluje rotacija sfernosimetričan hamiltonijan. Pošto je

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V(r), L_y \right] = 0$$

što se lako dokazuje, onda ćemo imati da je

$$U \left(\frac{p^2}{2m} + V(r) \right) U^\dagger = \frac{p^2}{2m} + V(r).$$

5.12 Primenom Baker–Campbell–Hausdorff-ove formule dobijamo

$$\begin{aligned} L'_i &= U^\dagger(\vec{a}) L_i U(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar} a_j p_j} L_i e^{\frac{i}{\hbar} a_j p_j} \\ &= L_i - \frac{i}{\hbar} a_j [p_j, L_i] + \frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 a_k a_j [p_k, [p_j, L_i]] + \dots \end{aligned}$$

Pošto je $[p_j, L_i] = -i\hbar \varepsilon_{ijl} p_l$, znamo kako izgleda drugi sabirak, a vidimo i da su treći kao i svi ostali sabirci 0 jer se svode na komutatore dva impulsa. Prema tome, imamo da je

$$L'_i = L_i - \varepsilon_{ijl} a_j p_l = (\vec{L} - \vec{a} \times \vec{p})_i,$$

što je trebalo pokazati. Da bismo odredili komutator $[\vec{L}, \vec{L}']$ prisetimo se **4.7 a)** tako da je

$$[\vec{L}, \vec{L}'] = [L_i, L'_i] = [L_i, L_i - \varepsilon_{ijk} a_j p_k] = -\varepsilon_{ijk} a_j [L_i, p_k] = i\hbar \underbrace{\varepsilon_{ikj} \varepsilon_{ikl}}_{2\delta_{jl}} a_j p_l = 2i\hbar \vec{a} \cdot \vec{p}.$$

5.13 Odredimo najpre disperziju x -komponente momenta impulsa. Najpre ćemo izračunati očekivanu vrednost L_x u stanju $|l, m\rangle$

$$\begin{aligned}\langle L_x \rangle_{|l,m\rangle} &= \langle l, m | L_x | l, m \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle l, m | L_+ + L_- | l, m \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle l, m | \left(\hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} | l, m+1 \rangle + \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} | l, m-1 \rangle \right) \\ &= 0,\end{aligned}$$

jer je $\langle l, m | l', m' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$. Zatim računamo očekivanu vrednost od L_x^2 .

$$\begin{aligned}\langle L_x^2 \rangle_{|l,m\rangle} &= \langle l, m | L_x^2 | l, m \rangle \\ &= \frac{1}{4} \langle l, m | (L_+ + L_-)(L_+ + L_-) | l, m \rangle \\ &= \frac{1}{4} \langle l, m | L_+ L_- + L_- L_+ | l, m \rangle.\end{aligned}$$

Ovde smo primetili da su $\langle l, m | L_+^2 | l, m \rangle = \langle l, m | L_-^2 | l, m \rangle = 0$, jer se kvantni broj m u bra i ket-u razlikuje za 2. Dobijeni izraz ćemo najlakše odrediti ako se setimo da je (videti zadatak 4.6 c)

$$L_+ L_- = L^2 - L_z^2 + \hbar L_z, \quad L_- L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z,$$

pa imamo da je

$$\langle L_x^2 \rangle_{|l,m\rangle} = \frac{1}{2} \langle l, m | L^2 - L_z^2 | l, m \rangle = \frac{\hbar^2}{2} (l(l+1) - m^2).$$

Ovaj rezultat ćemo proveriti tako što ćemo ga izračunati na još jedan način. pošto je L_x hermit-ski operator onda je

$$\langle L_x^2 \rangle_{|l,m\rangle} = \underbrace{\langle l, m | L_x^\dagger}_{\langle v |} \underbrace{L_x | l, m \rangle}_{|v\rangle} = \|v\|^2 = |L_x | l, m \rangle|^2.$$

Dakle, treba da odredimo normu vektora $L_x | l, m \rangle$ koji je

$$L_x | l, m \rangle = \frac{\hbar}{2} \left(\sqrt{l(l+1) - m(m+1)} | l, m+1 \rangle + \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} | l, m-1 \rangle \right)$$

te je

$$|L_x | l, m \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{4} (l(l+1) - m(m+1) + l(l+1) - m(m-1)) = \frac{\hbar^2}{2} (l(l+1) - m^2).$$

Na isti način dobija se

$$\langle L_y \rangle_{|l,m\rangle} = 0, \quad \langle L_y^2 \rangle_{|l,m\rangle} = \frac{\hbar^2}{2} (l(l+1) - m^2),$$

tako da je

$$\Delta L_x = \Delta L_y = \hbar \sqrt{\frac{l(l+1) - m^2}{2}}.$$

Očekivana vrednost od L_z se lako nalazi

$$\langle L_z \rangle_{|l,m\rangle} = \langle l, m | L_z | l, m \rangle = m\hbar,$$

i slično

$$\langle L_z^2 \rangle_{|l,m\rangle} = \langle l, m | L_z^2 | l, m \rangle = m^2 \hbar^2,$$

tako da je

$$\Delta L_z = 0,$$

što je očekivan rezultat, pošto je $|l, m\rangle$ svojstveno stanje operatora L_z .

5.14 Koristeći rezultate prethodnog zadatka imamo

$$(\Delta L)_{|l,m\rangle}^2 = (\Delta L_x)^2 + (\Delta L_y)^2 + (\Delta L_z)^2 = \hbar^2(l(l+1) - m^2).$$

Za fiksiranu vrednost l ovaj izraz će biti najmanji kad je $m = \pm l$, odnosno za stanje minimalne ili maksimalne projekcije momenta impulsa na z -osu. Dakle

$$(\Delta L)_{\min}^2 = (\Delta L)_{|l,\pm l\rangle}^2 = \hbar^2 l.$$

5.15 Pošto je svojstvena vrednost operatora L^2 jednaka $2\hbar^2$, kvantni broj l je

$$\hbar^2 l(l+1) = 2\hbar^2 \Rightarrow l = 1.$$

Rešenje $l = -2$ smo odbacili kao nefizičko ($l \geq 0$). Dimenzija potprostora $l = 1$ je $\dim V_{l=1} = 2l + 1 = 3$ i jedan bazis u tom prostoru stanja je $\beta(V_{l=1}) = \{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}$. To je standardan bazis i u njemu je operator L_z dijagonalan. Bazisna stanja su svojstvena za L^2 i L_z . U ovom zadatku treba da odredimo stanja koja su svojstvena za L^2 i L_x . Stoga najpre treba da nađemo matricu koja reprezentuje operator L_x u standardnom bazisu. Pošto je $L_x = (L_+ + L_-)/2$, najpre ćemo odrediti kako se reprezentuju L_{\pm} . Na osnovu jednačine (5.80) nalazimo da je

$$L_+|1, 1\rangle = 0, \quad L_+|1, 0\rangle = \hbar\sqrt{2}|1, 1\rangle, \quad L_+|1, -1\rangle = \hbar\sqrt{2}|1, 0\rangle,$$

tako da je

$$L_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Operator spuštanja z komponente momenta impulsa najlakše nazimo ako se setimo da je $L_- = L_+^\dagger$ pa je

$$L_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Dakle, matrica koja reprezentuje operator L_x je

$$L_x = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Rešavanjem svojstvenog problema ove matrice dobijaju se svojstvene vrednosti $\lambda_1 = \hbar$, $\lambda_2 = 0$ i $\lambda_3 = -\hbar$. To su mogući rezultati merenja L_x komponente momenta impulsa i oni su isti kao kada se meri L_z . Svojstveni vektori su

$$|L_x, \hbar\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |L_x, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |L_x, -\hbar\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Napisan preko sfernih harmonika, vektor kome odgovara svojstvena vrednost \hbar je

$$|L_x, \hbar\rangle = \frac{Y_1^1 + \sqrt{2}Y_1^0 + Y_1^{-1}}{2} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{z - iy}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}.$$

Ovde su iskorišćeni izrazi za sferne harmonike dobijeni u zadatku **4.17**. Na istovetan način se dobija da su

$$|L_x, 0\rangle = \frac{Y_1^1 - Y_1^{-1}}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{-x}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}},$$

$$|L_x, -\hbar\rangle = \frac{Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0 + Y_1^{-1}}{2} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{-z - iy}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}.$$

To su isti izrazi kao i kod sfernih harmonika duž z -ose ako se izvrši smena $x \leftrightarrow -z$.

5.16 Nakon merenja komponente L_z dobijen je rezultat \hbar , tako da je nakon tog merenja stanje čestice

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Potom se meri L_x komponenta. U prethodnom zadatku smo rešili svojstveni problem od L_x . Mogući rezultati merenja L_x su njegove svojstvene vrednosti, a dobili smo da su one $\{\hbar, 0, -\hbar\}$. Da bismo dobili verovatnoće ovih rezultata, potrebno je početno stanje napisati kao linearnu kombinaciju svojstvenih vektora od L_x

$$|\psi\rangle = c_1|L_x, \hbar\rangle + c_0|L_x, 0\rangle + c_{-1}|L_x, -\hbar\rangle.$$

Koristeći ortogonalnost svojstvenih stanja, nalazimo da su koeficijenti razvoja

$$c_1 = \langle L_x, \hbar | \psi \rangle = \frac{1}{2}, \quad c_0 = \langle L_x, 0 | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_{-1} = \langle L_x, -\hbar | \psi \rangle = \frac{1}{2}.$$

Stoga su verovatnoće pojedinačnih rezultata

$$\text{ver}(L_x, \hbar) = |c_1|^2 = \frac{1}{4}, \quad \text{ver}(L_x, 0) = |c_0|^2 = \frac{1}{2}, \quad \text{ver}(L_x, -\hbar) = |c_{-1}|^2 = \frac{1}{4}.$$

5.17 Od ranije znamo da je

$$\begin{aligned} L^2|l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle, \\ L_z|l, m\rangle &= \hbar m|l, m\rangle, \\ L_{\pm}|l, m\rangle &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}|l, m \pm 1\rangle. \end{aligned}$$

Da bismo videli kako operatori x_{\pm} deluju na stanja, izračunaćemo zadate komutatore.

a) Koristeći zadatke 4.4 i 4.5 dobijamo da je

$$\begin{aligned} [L_z, x_{\pm}] &= [L_z, x \pm iy] = [L_z, x] \pm i[L_z, y] = i\hbar y \pm \hbar x = \pm \hbar(x \pm iy) = \pm \hbar x_{\pm}, \\ [L_{\pm}, x_{\pm}] &= [L_x \pm iL_y, x \pm iy] = \pm i \underbrace{[L_x, y]}_{i\hbar z} \pm i \underbrace{[L_y, x]}_{-i\hbar z} = \mp \hbar z \pm \hbar z = 0, \\ [L_{\pm}, x_{\mp}] &= [L_x \pm iL_y, x \mp iy] = \mp i \underbrace{[L_x, y]}_{i\hbar z} \pm i \underbrace{[L_y, x]}_{-i\hbar z} = \pm \hbar z \pm \hbar z = \pm 2\hbar z, \\ [L^2, x_{\pm}] &= [L_{\mp}L_{\pm} + L_z^2 \pm \hbar L_z, x_{\pm}] = [L_{\mp}, x_{\pm}]L_{\pm} + [L_z^2, x_{\pm}] \pm \hbar[L_z, x_{\pm}] \\ &= \mp 2\hbar z L_{\pm} + L_z[L_z, x_{\pm}] + [L_z, x_{\pm}]L_z + \hbar^2 x_{\pm} \\ &= \mp 2\hbar z L_{\pm} \pm \hbar L_z x_{\pm} \pm \hbar x_{\pm} L_z + \hbar^2 x_{\pm} \\ &= \mp 2\hbar z L_{\pm} \pm \hbar[L_z, x_{\pm}] \pm 2\hbar x_{\pm} L_z + \hbar^2 x_{\pm} \\ &= \mp 2\hbar z L_{\pm} \pm 2\hbar x_{\pm} L_z + 2\hbar^2 x_{\pm}. \end{aligned}$$

b) Komutatori iz prethodnog dela zadatka daju

$$L^2 x_{\pm} |l, l\rangle = [L^2, x_{\pm}] |l, l\rangle + x_{\pm} L^2 |l, l\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= 2\hbar(-zL_+ + x_+L_z + \hbar x_+)|l, l\rangle + \hbar^2 l(l+1)x_+|l, l\rangle \\
&= 2\hbar^2 l x_+|l, l\rangle + 2\hbar^2 x_+|l, l\rangle + \hbar^2 l(l+1)x_+|l, l\rangle \\
&= \hbar^2(l+1)(l+2)x_+|l, l\rangle,
\end{aligned}$$

što znači da je $x_+|l, l\rangle$ svojstveni vektor operatora L^2 za svojstvenu vrednost $(l+1)$. Slično tome imamo

$$L_z x_+|l, l\rangle = [L_z, x_+]|l, l\rangle + x_+ L_z|l, l\rangle = \hbar x_+|l, l\rangle + l\hbar x_+|l, l\rangle = \hbar(l+1)x_+|l, l\rangle$$

što znači da je $x_+|l, l\rangle$ svojstven i za operator L_z i odgovarajuća svojstvena vrednost je $(l+1)$. Dakle,

$$|l+1, l+1\rangle = C x_+|l, l\rangle,$$

gde je C konstanta normalizacije. Drugim rečima, operator x_+ vektor maksimalne projekcije momenta impulsa u svojstvenom potprostoru V_l prevodi u vektor maksimalne projekcije momenta impulsa u potprostoru V_{l+1} .

- c) Stanje $|l, m\rangle$ se, do na normalizaciju, može dobiti ako na $|0, 0\rangle$ najpre deluje l puta operator x_+ a onda $(l-m)$ puta operator L_-

$$|l, m\rangle = C_{lm} L_-^{l-m} x_+^l |0, 0\rangle.$$

5.18 Osobine **a)**, **b)** i **d)** pokazaćemo neposrednim računom, dok ćemo osobinu **c)** izvesti iz **a)** i **b)**.

- a)** Lako se pokazuje da je

$$\sigma_1^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I,$$

i isto tako $\sigma_2^2 = \sigma_3^2 = I$.

- b)** Proizvod dve različite sigma matrice je se (do na $\pm i$) treća sigma matrica. Da je to tako proveravamo množenjem

$$\sigma_1 \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i \sigma_3,$$

$$\sigma_2 \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -i \sigma_3,$$

Uzmemo li druge parove indeksa, dobićemo $\sigma_2 \sigma_3 = -\sigma_3 \sigma_2 = i \sigma_1$ i $\sigma_3 \sigma_1 = -\sigma_1 \sigma_3 = i \sigma_2$. Prema tome, sigma matrice antikomutiraju.

- c)** Formula

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} I + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k,$$

sadrži sve što smo pokazali u prethodna dva dela zadatka. Ako uzmemo da su indeksi isti dobijamo jednu od tri formule iz dela pod **a)**. Tako je za npr. $i = j = 1$

$$\sigma_1 \sigma_1 = \underbrace{\delta_{11}}_1 I + i \underbrace{\varepsilon_{11k}}_0 \sigma_k = I,$$

dok se za različite indekse dobija jedna od formula iz dela **b)**. Uzmimo da je $i = 1$ i $j = 2$ pa se formula svodi na

$$\sigma_1 \sigma_2 = \underbrace{\delta_{12}}_0 I + i \underbrace{\varepsilon_{12k}}_{\sigma_3} \sigma_k = i \sigma_3.$$

Pošto smo utvrdili da važi prva formula iz ovog dela zadatka, možemo je iskoristiti da pokažemo i preostale dve. Tako je

$$[\sigma_i, \sigma_j] = \sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i = \delta_{ij} I + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k - \delta_{ji} I - \underbrace{i \varepsilon_{jik} \sigma_k}_{-\varepsilon_{ijk}} = 2i \varepsilon_{ijk} \sigma_k,$$

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = \delta_{ij} I + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ji} I + \underbrace{i \varepsilon_{jik} \sigma_k}_{-\varepsilon_{ijk}} = 2\delta_{ij} I.$$

d) Determinanta bilo koje sigma matrice je -1 .

$$\det \sigma_1 = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = -1, \quad \det \sigma_2 = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix} = -1, \quad \det \sigma_3 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} = -1.$$

Krajnje jednostavno se uočava da su sigma matrice nultog traga $\text{tr} \sigma_i = 0$. Iz ove dve osobine sledi još jedna zanimljiva karakteristika ovih matrica: zbir svojstvenih vrednosti sigma matrica je nula a proizvod -1 , iz čega sledi da su svojstvene vrednosti -1 i 1 .

5.19 Matrica $\sigma_{\vec{n}}$ je

$$\sigma_{\vec{n}} = \sin \theta \cos \varphi \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \sin \theta \sin \varphi \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}.$$

Karakteristična jednačina je

$$\det(\sigma_{\vec{n}} - \lambda I) = \begin{vmatrix} \cos \theta - \lambda & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta - \lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow -\cos^2 \theta + \lambda^2 - \sin^2 \theta = 0 \Rightarrow \lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1.$$

Daljim rešavanjem svojstvenog problema dobija se da svojstvenoj vrednosti $\lambda_1 = -1$ odgovara stanje

$$|\sigma_{\vec{n}}, -1\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix},$$

dok je svojstveni vektor za $\lambda_2 = 1$

$$|\sigma_{\vec{n}}, 1\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

5.20 Operator rotacije za ugao α oko ose \vec{n} u spinskom prostoru je

$$U = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \vec{s}\right) = \exp\left(-\frac{i}{2} \alpha \vec{n} \cdot \vec{\sigma}\right).$$

a) Razvojem u Taylor-ov red eksponencijalne funkcije dobijamo

$$U = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{2} \alpha \vec{n} \cdot \vec{\sigma}\right)^k$$

Pošto je

$$(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^2 = n_i \sigma_i n_j \sigma_j = n_i n_j (\delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k) = n_i n_i = \vec{n}^2 = 1,$$

vidimo da je zgodno razdvojiti sabirke sa parnim i neparnim stepenima u Taylor-ovom razvoju jer su $(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^{2k} = 1$ i $(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^{2k+1} = \vec{n} \cdot \vec{\sigma}$. Tako se dalje dobija

$$U = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} (-1)^k \left(\frac{\alpha}{2}\right)^{2k} - i \vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} (-1)^k \left(\frac{\alpha}{2}\right)^{2k+1},$$

što se može napisati u traženoj formi

$$U = I \cos \frac{\alpha}{2} - i \vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin \frac{\alpha}{2}.$$

- b) Da bismo odredili vrednost traženog izraza, možemo da iskoristimo Baker-Campbell-Hausdorff-ovu formulu, a moguće je i iskoristiti rezultat iz prethodnog dela zadatka tako da imamo

$$\begin{aligned} U\vec{\sigma}U^\dagger &= \left(I \cos \frac{\alpha}{2} - i\vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \vec{\sigma} \left(I \cos \frac{\alpha}{2} - i\vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin \frac{\alpha}{2} \right)^\dagger \\ &= \left(I \cos \frac{\alpha}{2} - i\vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \vec{\sigma} \left(I \cos \frac{\alpha}{2} + i\vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \\ &= \vec{\sigma} \cos^2 \frac{\alpha}{2} - i((\vec{n} \cdot \vec{\sigma})\vec{\sigma} - \vec{\sigma}(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})) \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} + (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2}. \end{aligned}$$

Izraz u zagradi u drugom sabirku je

$$\begin{aligned} (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})\vec{\sigma} - \vec{\sigma}(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) &= n_j \sigma_j \sigma_i \vec{e}_i - \sigma_i \vec{e}_i n_j \sigma_j = n_j \vec{e}_i (\delta_{ji} + i\epsilon_{jik} \sigma_k - \delta_{ij} - i\epsilon_{ijk} \sigma_k) \\ &= \vec{n} - 2i\vec{e}_i \epsilon_{ijk} n_j \sigma_k - \vec{n} = 2i\vec{\sigma} \times \vec{n}, \end{aligned}$$

pa imamo da je

$$U\vec{\sigma}U^\dagger = \vec{\sigma} \cos^2 \frac{\alpha}{2} + 2 \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} (\vec{\sigma} \times \vec{n}) + \sin^2 \frac{\alpha}{2} = \vec{\sigma} \cos^2 \frac{\alpha}{2} + \sin \alpha (\vec{\sigma} \times \vec{n}) + \sin^2 \frac{\alpha}{2}.$$

- c) Rotacija za 2π je predstavljena matricom

$$U(\alpha = 2\pi) = I \cos \pi - i\vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin \pi = -I.$$

Dakle, rotacija za 2π nije jedinična transformacija. Tek za $\alpha = 4\pi$ imamo da je U jedinična matrica.

- d) Ukoliko je osa rotacije usmerena oko $\vec{n} = \vec{e}_z$ onda je

$$U = I \cos \frac{\alpha}{2} - i\sigma_3 \sin \frac{\alpha}{2}.$$

Ako je ugao rotacije infinitezimalan onda je

$$U = I - i\frac{\alpha}{2}\sigma_3.$$

Razdvojimo li jediničnu matricu od ostatka, dobijamo da je infinitezimalna transformacija opisana s

$$\Lambda = -i\frac{\alpha}{2}\sigma_3.$$

5.21 Neutroni u snopu koji prolazi kroz homogeno magnetno polje \vec{B} precesiraju oko polja. Hamiltonijan koji opisuje interakciju spina sa magnetnim poljem je $H = \vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Za neutron je

$$\vec{\mu} = g_n \mu_N \vec{s} = g_n \mu_N \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

gde su g_n žiromagnetni odnos za neutron i μ_N nuklearni magneton (koji je 1836 puta manji od Bohr-ovog magnetona). Prema tome, hamiltonijan je u našem slučaju

$$H = g_n \mu_N B \frac{\hbar}{2} \sigma_3.$$

Snop koji prolazi kroz polje evoluira delovanjem evolucionog operatora

$$U_1(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = e^{-\frac{i}{2} g_n \mu_N B t \sigma_3} = \cos \frac{g_n \mu_N B t}{2} I - i \sin \frac{g_n \mu_N B t}{2} \sigma_3 = \begin{pmatrix} e^{-i \frac{g_n \mu_N B}{2} t} & 0 \\ 0 & e^{i \frac{g_n \mu_N B}{2} t} \end{pmatrix},$$

dok drugi snop, koji ne oseća magnetno polje evoluira trivijalno $U_2 = I$.

a) Ako je početno spinsko stanje neutrona

$$\psi_a = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

onda će deo snopa koji prolazi kroz magnetno polje nakon vremena t biti u stanju

$$|\psi_a^{(1)}(t)\rangle = U_1(t)|\psi_a(0)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{g_n\mu_N B}{2}t} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{g_n\mu_N B}{2}t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{g_n\mu_N B}{2}t} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Drugi smo ostaje nepromenjen

$$|\psi_a^{(2)}(t)\rangle = U_2(t)|\psi_a(0)\rangle = I \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Kada se snopovi spoje dobija se stanje

$$|\psi_a(t)\rangle = |\psi_a^{(1)}(t)\rangle + |\psi_a^{(2)}(t)\rangle = \begin{pmatrix} 1 + e^{-i\frac{g_n\mu_N B}{2}t} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \cos\frac{g_n\mu_N B t}{2} + i \sin\frac{g_n\mu_N B t}{2} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Dakle, dolazi do interferencije jer je

$$||\psi_a(t)\rangle|^2 = 2 + 2 \cos\frac{g_n\mu_N B t}{2} = 4 \cos^2\frac{g_n\mu_N B t}{4}.$$

b) Za početno stanje

$$\psi_b = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

dobija se

$$|\psi_b(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 + e^{-i\frac{g_n\mu_N B}{2}t} \\ 1 + e^{i\frac{g_n\mu_N B}{2}t} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 + \cos\frac{g_n\mu_N B t}{2} - i \sin\frac{g_n\mu_N B t}{2} \\ 1 + \cos\frac{g_n\mu_N B t}{2} + i \sin\frac{g_n\mu_N B t}{2} \end{pmatrix}.$$

I ovo stanje daje istu interferenciju jer je

$$||\psi_b(t)\rangle|^2 = \frac{1}{2} (2 + 2 \cos\frac{g_n\mu_N B t}{2}) \cdot 2 = 4 \cos^2\frac{g_n\mu_N B t}{4}$$

5.22 Nakon prolaska kroz prvi Stern-Gerlach-ov analizator elektroni u snopu se nalaze u svojstvenom stanju projekcije spina na z -osu kojoj odgovara svojstvena vrednost $\hbar/2$. Operator projekcije spina na z -osu

$$s_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

je srazmeran sa σ_3 matricom i prema tome dijagonalan. Zato su svojstveni vektori od s_z

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |+\rangle = |\uparrow_z\rangle, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |-\rangle = |\downarrow_z\rangle,$$

sa svojstvenim vrednostima $\hbar/2$ i $-\hbar/2$ respektivno. Ove vektore ćemo koristiti i kao bazis. Dakle, nakon pre ulaska u drugi Stern-Gerlach-ov analizator elektroni u snopu su u stanju

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |+\rangle = |\uparrow_z\rangle.$$

- a) Elektroni u snopu dolaze na Stern-Gerlach-ov analizator usmeren duž z -ose. Oni su u svojstvenom stanju operatora s_z tako da ovo merenje ne menja stanje čestica u snopu.
- b) Prilikom merenja spina Stern-Gerlach-ovim analizatorom usmerenim duž x -ose mogu se dobiti svojstvene vrednosti operatora s_x . Kako je

$$s_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_1.$$

Rešavanjem svojstvenog problema matrice σ_1 dobijamo da su svojstvene vrednosti 1 i -1 (tako da su svojstvene vrednosti od s_x jednake $\hbar/2$ i $-\hbar/2$), a svojstveni vektori su

$$|\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Da bismo našli verovatnoće pojavljivanja pojedinačnih rezultata potrebno je da početno stanje napišemo kao linearnu kombinaciju svojstvenih vektora od s_x . Lako nalazimo da je

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow_x\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow_x\rangle.$$

Na osnovu Born-ovog postulata određujemo verovatnoće da pri merenju s_x dobiju rezultati

$$\text{ver}\left(s_x, \frac{\hbar}{2}\right) = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}, \quad \text{ver}\left(s_x, -\frac{\hbar}{2}\right) = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}.$$

- c) Snop koji ima projekciju spina $-\hbar/2$ na x -osu opisan je stanjem

$$|\downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Ovo stanje je linearna kombinacija svojstvenih stanja operatora s_z

$$|\downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow_z\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow_z\rangle.$$

Ako se na datom snopu izmeri projekcija spina na z -osu dobićemo jedan od dva moguća rezultata ($\hbar/2$ i $-\hbar/2$) sa verovatnoćama

$$\text{ver}\left(s_z, \frac{\hbar}{2}\right) = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}, \quad \text{ver}\left(s_z, -\frac{\hbar}{2}\right) = \left|-\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}.$$

Ovo je vrlo zanimljiv rezultat i posledica je čisto kvantnih efekata, pa zaslužuje komentar. Najpre smo merili spin u pravcu z ose i dobili projekciju $\hbar/2$ pa smo merili projekciju spina na x -osu i dobili $-\hbar/2$. Kad na tom snopu merimo ponovo s_z dobijamo da su verovatnoće za oba moguća rezultata jednaka $1/2$. Dakle, merenjem s_x talasna funkcija je kolapsirala u neko svojstveno stanje tog operatora, čime je sistem izgubio osobine vezane za s_z koje je imao pre merenja. Ovo je posledica činjenice da se s_x i s_z ne mogu istovremeno odrediti (jer ne komutiraju).

5.23 Da bi operatori S_z i S_{\pm} predstavljali reprezentaciju spina s , potrebno je da zadovoljavaju sledeće relacije

$$[S_z, S_{\pm}] = \pm\hbar S_{\pm}, \quad [S_+, S_-] = 2\hbar S_z, \quad S^2 = \hbar s(s+1)I.$$

Koristeći komutacionu relaciju između kreacionog i anihilacionog operatora

$$[a, a^\dagger] = 1,$$

proverićemo da li operatori definisani u formulaciji zadatka zaista zadovoljavaju ove relacije. Najpre proveravamo

$$\begin{aligned} [S_z, S_+] &= \left[\hbar(s - a^\dagger a), \hbar\sqrt{2s} \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} a \right] = \hbar^2\sqrt{2s} \left[s - a^\dagger a, \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} a \right] \\ &= -\hbar^2\sqrt{2s} \left[a^\dagger a, \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} a \right] \\ &= -\hbar^2\sqrt{2s} \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} [a^\dagger a, a] - \hbar^2\sqrt{2s} \left[a^\dagger a, \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} \right] a \\ &= -\hbar^2\sqrt{2s} \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} [a^\dagger, a] a = \hbar^2\sqrt{2s} \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} a = S_+. \quad \checkmark \end{aligned}$$

Ovde smo u trećem redu iskoristili da je komutator $a^\dagger a$ i funkcije od $a^\dagger a$ jednak 0, što je posledica činjenice da $a^\dagger a$ komutira sa sobom i sa bilo kojim svojim stepenom. Na isti način se pokazuje i da je $[S_z, S_-] = -\hbar S_-$. Sledeći komutator je

$$\begin{aligned} [S_+, S_-] &= \left[\hbar\sqrt{2s} \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} a, \hbar\sqrt{2s} a^\dagger \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} \right] \\ &= 2s\hbar^2 \left[\left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} a, a^\dagger \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} \right] \\ &= 2s\hbar^2 \left(\left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} a a^\dagger \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} - a^\dagger \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right) a \right) \\ &= 2s\hbar^2 \left(\left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} (1 + a^\dagger a) \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} - a^\dagger a + \frac{a^\dagger a^\dagger a a}{2s} \right) \\ &= 2s\hbar^2 \left(\left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right) (1 + a^\dagger a) - a^\dagger a + \frac{a^\dagger a^\dagger a a}{2s} \right) \\ &= 2s\hbar^2 \left(1 + a^\dagger a - \frac{a^\dagger a}{2s} - \frac{a^\dagger a a^\dagger a}{2s} - a^\dagger a + \frac{a^\dagger a^\dagger a a}{2s} \right) \\ &= 2s\hbar^2 \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s} - \frac{a^\dagger (1 + a^\dagger a) a}{2s} + \frac{a^\dagger a^\dagger a a}{2s} \right) \\ &= 2s\hbar^2 \left(1 - \frac{a^\dagger a}{s} \right) = 2\hbar^2 (s - a^\dagger a) = 2\hbar S_z. \quad \checkmark \end{aligned}$$

preostalo je još da pokažemo čemu je jednak S^2 . To može da se uradi na sledeći način

$$\begin{aligned} S^2 &= S_+ S_- + S_z^2 - \hbar S_z \\ &= 2s\hbar^2 \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} a a^\dagger \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} + \hbar^2 (s - a^\dagger a)^2 - \hbar (s - a^\dagger a) \\ &= 2s\hbar^2 \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} (1 + a^\dagger a) \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} + \hbar^2 (s - a^\dagger a)(s - a^\dagger a) - \hbar (s - a^\dagger a) \\ &= 2s\hbar^2 \left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right) (1 + a^\dagger a) + \hbar^2 (s - a^\dagger a)(s - a^\dagger a) - \hbar (s - a^\dagger a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \hbar^2 (2s + 2sa^\dagger a - a^\dagger a - a^\dagger a a^\dagger a + s^2 - 2sa^\dagger a + a^\dagger a a^\dagger a - s + a^\dagger a) \\
&= \hbar^2 s(s+1)I. \quad \checkmark
\end{aligned}$$

Vidimo da se ovde zaista radi o reprezentaciji spina s . U konkretnom slučaju, ako uzmemo da je $s = 1/2$ dobićemo da su operatori spina pola:

$$S_z = \frac{\hbar}{2} - \hbar a^\dagger a, \quad S_+ = \hbar (1 - a^\dagger a)^{1/2} a, \quad S_- = \hbar a^\dagger (1 - a^\dagger a)^{1/2}.$$

5.24 Definisali smo

$$J_z = \frac{\hbar}{2} (a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2), \quad J_+ = \hbar a_1^\dagger a_2, \quad J_- = \hbar a_2^\dagger a_1.$$

Pošto je $J_\pm = J_x \pm iJ_y$, operatori J_x i J_y su jednaki

$$J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-) = \frac{\hbar}{2}(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1), \quad J_y = -\frac{i}{2}(J_+ - J_-) = -\frac{i\hbar}{2}(a_1^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1)$$

a) Da bismo odredili algebru koju zadovoljavaju operatori J_x , J_y i J_z naćićemo njihove komutatore. Tako je

$$\begin{aligned}
[J_x, J_y] &= \left[\frac{\hbar}{2} (a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1), -\frac{i\hbar}{2} (a_1^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1) \right] \\
&= -\frac{i\hbar^2}{4} [a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1, a_1^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1] \\
&= -\frac{i\hbar^2}{4} \left(\underbrace{[a_1^\dagger a_2, a_1^\dagger a_2]}_0 - [a_1^\dagger a_2, a_2^\dagger a_1] + [a_2^\dagger a_1, a_1^\dagger a_2] - \underbrace{[a_2^\dagger a_1, a_2^\dagger a_1]}_0 \right) \\
&= \frac{i\hbar^2}{2} [a_1^\dagger a_2, a_2^\dagger a_1] \\
&= \frac{i\hbar^2}{2} \left(a_1^\dagger [a_2, a_2^\dagger a_1] + [a_1^\dagger, a_2^\dagger a_1] a_2 \right) \\
&= \frac{i\hbar^2}{2} \left(a_1^\dagger \left(\underbrace{[a_2, a_1]}_0 + \underbrace{[a_2, a_2^\dagger]}_1 a_1 \right) + \left(\underbrace{[a_1^\dagger, a_1]}_{-1} + \underbrace{[a_1^\dagger, a_2^\dagger]}_0 a_1 \right) a_2 \right) \\
&= \frac{i\hbar^2}{2} (a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2) \\
&= i\hbar L_z.
\end{aligned}$$

Isto tako bi se pokazalo da važi

$$[J_y, J_z] = i\hbar J_x, \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y.$$

Operator J^2 računamo na sledeći način:

$$\begin{aligned}
J^2 &= J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \\
&= \frac{\hbar^2}{4} \left(\cancel{a_1^\dagger a_2 a_1^\dagger a_2} + a_1^\dagger a_2 a_2^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_1 a_1^\dagger a_2 + \cancel{a_2^\dagger a_1 a_2^\dagger a_1} \right. \\
&\quad - \cancel{a_1^\dagger a_2 a_1^\dagger a_2} + a_1^\dagger a_2 a_2^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_1 a_1^\dagger a_2 - \cancel{a_2^\dagger a_1 a_2^\dagger a_1} \\
&\quad \left. + a_1^\dagger a_1 a_1^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_2 a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 a_2^\dagger a_2 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar^2}{4} \left(2a_1^\dagger a_1 a_2 a_2^\dagger + 2a_1 a_1^\dagger a_2^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 a_1^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_2 a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 a_2^\dagger a_2 \right) \\
&= \frac{\hbar^2}{4} \left(2N_1(1+N_2) + 2(1+N_1)N_2 + N_1^2 - 2N_1N_2 + N_2^2 \right) \\
&= \frac{\hbar^2}{4} \left(2(N_1+N_2) + (N_1+N_2)^2 \right) = \frac{\hbar^2}{4} N(N+2) \\
&= \frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right) \hbar^2
\end{aligned}$$

Ovde se često koristi $[N_1, N_2] = 0$. Do istog izraza može se doći i jednostavnije. Ako iskoristimo formulu $J^2 = J_+ J_- + J_z^2 - \hbar J_z$ onda je

$$J^2 = \hbar^2 \underbrace{a_1^\dagger a_2 a_2^\dagger a_1}_{N_1(1+N_2)} + \frac{\hbar^2}{4} (N_1 - N_2)^2 - \frac{\hbar^2}{2} (N_1 - N_2) = \frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right) \hbar^2.$$

b) S jedne strane znamo da je

$$J^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \quad J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle.$$

S druge strane, imamo da je $N_1 |n_1\rangle = n_1 |n_1\rangle$ i $N_2 |n_2\rangle = n_2 |n_2\rangle$ pa je i

$$\begin{aligned}
N |n_1\rangle |n_2\rangle &= (N_1 + N_2) |n_1\rangle |n_2\rangle = (N_1 |n_1\rangle) |n_2\rangle + |n_1\rangle (N_2 |n_2\rangle) = n_1 |n_1\rangle |n_2\rangle + n_2 |n_1\rangle |n_2\rangle \\
&= (n_1 + n_2) |n_1\rangle |n_2\rangle.
\end{aligned}$$

Zbog toga je

$$J^2 |n_1\rangle |n_2\rangle = \hbar^2 \frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right) |n_1\rangle |n_2\rangle = \hbar^2 \frac{n_1 + n_2}{2} \left(\frac{n_1 + n_2}{2} + 1 \right) |n_1\rangle |n_2\rangle.$$

Slično se pokazuje i da je

$$J_z |n_1\rangle |n_2\rangle = \frac{\hbar}{2} (a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2) |n_1\rangle |n_2\rangle = \frac{\hbar}{2} (n_1 - n_2) |n_1\rangle |n_2\rangle.$$

Poslednje dve jednačine ukazuju da je stanje $|n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle |n_2\rangle$ rešenje zajedničkog svojstvenog problema kvadrata momenta impulsa J^2 i njegove projekcije na z -osu. Da bismo stanje povezali sa uobičajenim oznakama kojim opisujemo stanja $|j, m\rangle$ koja su svojstvena za J^2 i J_z potrebno je da izjednačimo:

$$j = \frac{n_1 + n_2}{2}, \quad m = \frac{n_1 - n_2}{2}.$$

Inverzne relacije koje daju n_1 i n_2 preko j i m se lako dobijaju

$$n_1 = j + m, \quad n_2 = j - m.$$

Sad lako možemo da vidimo kako operator podizanja/spuštanja deluje na $|l, m\rangle$

$$\begin{aligned}
J_+ |l, m\rangle &= \hbar a_1^\dagger a_2 |n_1\rangle |n_2\rangle = \hbar (a_1^\dagger |n_1\rangle) (a_2 |n_2\rangle) = \hbar \sqrt{n_1 + 1} |n_1 + 1\rangle \sqrt{n_2} |n_2 - 1\rangle \\
&= \hbar \sqrt{(n_1 + 1)n_2} |n_1 + 1\rangle |n_2 - 1\rangle = \hbar \sqrt{(j + m + 1)(j - m)} |j, m + 1\rangle, \\
J_- |l, m\rangle &= \hbar a_1 a_2^\dagger |n_1\rangle |n_2\rangle = \hbar (a_1 |n_1\rangle) (a_2^\dagger |n_2\rangle) = \hbar \sqrt{n_1} |n_1 - 1\rangle \sqrt{n_2 + 1} |n_2 + 1\rangle \\
&= \hbar \sqrt{n_1(n_2 + 1)} |n_1 - 1\rangle |n_2 + 1\rangle = \hbar \sqrt{(j + m)(j - m + 1)} |j, m - 1\rangle,
\end{aligned}$$

što su dobro poznate formule (5.80) i (5.81).

- c) Stanje $|n_1\rangle|n_2\rangle$ dobija se iz osnovnog stanja delovanjem n_1 kreacionih operatora a_1^\dagger i n_2 kreacionih operatora a_2^\dagger

$$|n_1\rangle|n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!}} \frac{1}{\sqrt{n_2!}} (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} |0\rangle.$$

U prethodnom delu zadatka smo videli da je $|j, m\rangle = |n_1\rangle|n_2\rangle$ i našli smo kako zavise n_1 i n_2 od j i m . Stoga je

$$|j, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} (a_1^\dagger)^{j+m} (a_2^\dagger)^{j-m} |0\rangle.$$

5.25 Date bilinearne forme definisane su preko operatora kreacije i anihilacije, što nam sugeriše da odredimo njihovo delovanje na $|n_1\rangle|n_2\rangle$. Dobijeno stanje ćemo prepisati preko kvantnih brojeva j i m .

- a) Delovanje operatora J_\pm je ispitano u prethodnom zadatku. Dobili smo da je:

$$J_+|l, m\rangle = \hbar\sqrt{(j+m+1)(j-m)}|j, m+1\rangle, \quad J_-|l, m\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j, m-1\rangle,$$

što znači da ovi operatori povećavaju/smanjuju kvantni broj m . Izračunajmo

$$K_+|l, m\rangle = \hbar a_1^\dagger a_2^\dagger |n_1\rangle|n_2\rangle = \hbar\sqrt{n_1 n_2} |n_1+1\rangle|n_2+1\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m)} |j+1, m\rangle.$$

Ovde smo stanje $|j, m\rangle$ reprezentovali preko n_1 i n_2 pri čemu je $n_1 = j+m$ i $n_2 = j-m$. Dobili smo novo stanje koje je srazmerno sa vektorom $|n_1+1\rangle|n_2+1\rangle$ što se može napisati kao $|j', m'\rangle$ gde su

$$j' = \frac{n_1+1+n_2+1}{2} = j+1, \quad m' = \frac{n_1+1-(n_2+1)}{2} = m.$$

Istovetno se pokazuje da je

$$K_-|l, m\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m)}|j-1, m\rangle,$$

pa vidimo da su K_\pm operatori podizanja/spuštanja kvantnog broja l . Na isti način nalazimo

$$I_\pm|j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j+m\pm 1)}|j\pm 1, m\pm 1\rangle,$$

kao i

$$L_\pm|j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j-m\pm 1)}|j\pm 1, m\mp 1\rangle.$$

Dakle, I_\pm podiže/spušta kvantne brojeve j i m , dok L_\pm podigne/spusti j i spusti/podigne m .

- b) Ovi komutatori se računaju slično kao i komutatori u delu a) prethodnog zadatka. Tako npr. imamo

$$[K_+, K_-] = [\hbar a_1^\dagger a_2^\dagger, \hbar a_1 a_2] = \hbar^2 (a_1^\dagger \underbrace{[a_2^\dagger, a_1 a_2]}_{-a_1} + \underbrace{[a_1^\dagger, a_1 a_2]}_{-a_2} a_2^\dagger) = -\hbar^2 (a_1^\dagger a_1 + \underbrace{a_2 a_2^\dagger}_{1+a_2^\dagger a_2}) = -2\hbar K_z,$$

i slično tome

$$[K_z, K_+] = \frac{\hbar^2}{2} [a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2, a_1^\dagger a_2^\dagger] = \frac{\hbar^2}{2} (a_1^\dagger a_2^\dagger + a_2^\dagger a_1^\dagger) = \hbar^2 a_1^\dagger a_2^\dagger = \hbar K_+.$$

Lako se pokazuju i ostale komutacione relacije i one imaju isti oblik kao i za K -operatore.

c) Treba da pokažemo da je

$$|\beta, \gamma\rangle = \frac{1}{\text{ch}^{1/2} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \frac{\beta^m \gamma^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} |j, m\rangle,$$

stanje jedinične norme

$$\langle \beta, \gamma | \beta, \gamma \rangle = 1$$

kao i da ima osobine

$$I_- |\beta, \gamma\rangle = \hbar \beta |\beta, \gamma\rangle, \quad K_- |\beta, \gamma\rangle = \hbar \gamma |\beta, \gamma\rangle.$$

Oznaka ξ je definisana preko normi kompleksnih brojeva β i γ i videćemo čemu je ona jednaka. Pokažimo najpre prvu osobinu.

$$\begin{aligned} \langle \beta, \gamma | \beta, \gamma \rangle &= \frac{1}{\text{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \sum_{j'=0}^{\infty} \sum_{m'=-j'}^{j'} \frac{(\beta^*)^{m'} (\gamma^*)^{j'-m'} \beta^m \gamma^{j-m}}{\sqrt{(j'+m')!(j'-m')!(j+m)!(j-m)!}} \underbrace{\langle j', m' | j, m \rangle}_{\delta_{jj'} \delta_{mm'}} \\ &= \frac{1}{\text{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \frac{|\beta|^{2m} |\gamma|^{2j-2m}}{(j+m)!(j-m)!} \\ &= \frac{1}{\text{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{2j} \frac{|\beta|^{2(m-j)} |\gamma|^{2(2j-m)}}{m!(2j-m)!} \\ &= \frac{1}{\text{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{|\beta|^{-2j}}{(2j)!} \sum_{m=0}^{2j} \frac{(2j)!}{m!(2j-m)!} (|\beta|^2)^m (|\gamma|^2)^{(2j-m)} \\ &= \frac{1}{\text{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{|\beta|^{-2j}}{(2j)!} \sum_{m=0}^{2j} \binom{2j}{m} (|\beta|^2)^m (|\gamma|^2)^{(2j-m)} \\ &= \frac{1}{\text{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(2j)!} \frac{1}{|\beta|^{2j}} (|\beta|^2 + |\gamma|^2)^{2j} \\ &= \frac{1}{\text{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(2j)!} \left(\frac{|\beta|^2 + |\gamma|^2}{|\beta|} \right)^{2j} \\ &= \frac{1}{\text{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(2j)!} \xi^{2j} = \frac{1}{\text{ch} \xi} \cdot \text{ch} \xi = 1 \quad \checkmark \end{aligned}$$

Ovde smo najpre iskoristili ortogonalnost stanja $|l, m\rangle$, potom smo pomerili sumu po m za j , zatim smo iskoristili binomni razvoj

$$(a+b)^n = \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} a^m b^{n-m},$$

i na kraju smo uveli oznaku $\xi = (|\beta|^2 + |\gamma|^2)/|\beta|$. Preostale dve osobine se dokazuju slično:

$$\begin{aligned} I_- |\beta, \gamma\rangle &= \frac{1}{\text{ch}^{1/2} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \frac{\beta^m \gamma^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} I_- |j, m\rangle \\ &= \frac{1}{\text{ch}^{1/2} \xi} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \frac{\beta^m \gamma^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} \hbar \sqrt{(j+m)(j+m-1)} |j-1, m-1\rangle \\ &= \hbar \frac{1}{\text{ch}^{1/2} \xi} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \frac{\beta^m \gamma^{j-m}}{\sqrt{(j+m-2)!(j-m)!}} |j-1, m-1\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \hbar \frac{1}{\text{ch}^{1/2} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j+1}^{j+1} \frac{\beta^m \gamma^{j-m+1}}{\sqrt{(j+m-1)!(j-m+1)!}} |j, m-1\rangle \\
&= \hbar \frac{1}{\text{ch}^{1/2} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \frac{\beta^{m+1} \gamma^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} |j, m\rangle \\
&= \hbar \beta |\beta, \gamma\rangle \checkmark \\
K_- |\beta, \gamma\rangle &= \frac{1}{\text{ch}^{1/2} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \frac{\beta^m \gamma^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} K_- |j, m\rangle \\
&= \frac{1}{\text{ch}^{1/2} \xi} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{m=-j+1}^{j-1} \frac{\beta^m \gamma^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} \hbar \sqrt{(j+m)(j-m)} |j-1, m\rangle \\
&= \hbar \frac{1}{\text{ch}^{1/2} \xi} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{m=-j+1}^{j-1} \frac{\beta^m \gamma^{j-m}}{\sqrt{(j+m-1)!(j-m-1)!}} |j-1, m\rangle \\
&= \hbar \frac{1}{\text{ch}^{1/2} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \frac{\beta^m \gamma^{j+1-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} |j, m\rangle \\
&= \hbar \gamma |\beta, \gamma\rangle \checkmark
\end{aligned}$$

d) Očekivana vrednosti operatora J_x u stanju $|\beta, \gamma\rangle$ je

$$\langle J_x \rangle_{|\beta, \gamma\rangle} = \langle \beta, \gamma | J_x | \beta, \gamma \rangle = \frac{1}{2} \langle \beta, \gamma | J_+ | \beta, \gamma \rangle + \frac{1}{2} \langle \beta, \gamma | J_- | \beta, \gamma \rangle.$$

Odredimo najpre očekivanu vrednost J_+ u koherentnom stanju $|\beta, \gamma\rangle$

$$\begin{aligned}
\langle J_+ \rangle_{|\beta, \gamma\rangle} &= \frac{\hbar}{\text{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^{j-1} \sum_{j'=0}^{\infty} \sum_{m'=-j'}^{j'} \frac{(\beta^*)^{m'} (\gamma^*)^{j'-m'} \beta^m \gamma^{j-m}}{\sqrt{(j'+m')!(j'-m')!(j+m)!(j-m)!}} \\
&\quad \underbrace{\langle j', m' | j, m+1 \rangle}_{\delta_{jj'} \delta_{m', m+1}} \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \\
&= \frac{\hbar}{\text{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^{j-1} \frac{(\beta^*)^{m+1} (\gamma^*)^{j-m-1} \beta^m \gamma^{j-m}}{(j+m)!(j-m-1)!} \\
&= \beta^* \gamma \frac{\hbar}{\text{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{2j-1} \frac{(|\beta|^2)^{k-j} (|\gamma|^2)^{2j-1-k}}{k!(2j-1-k)!} \\
&= \beta^* \gamma \frac{\hbar}{\text{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{|\beta|^{2j-1} |\beta|} \frac{1}{(2j-1)!} \sum_{k=0}^{2j-1} \frac{(2j-1)!}{k!(2j-1-k)!} (|\beta|^2)^k (|\gamma|^2)^{2j-1-k} \\
&= \beta^* \gamma \frac{\hbar}{\text{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{|\beta|^{2j-1} |\beta|} \frac{1}{(2j-1)!} \sum_{k=0}^{2j-1} \binom{2j-1}{k} (|\beta|^2)^k (|\gamma|^2)^{2j-1-k} \\
&= \frac{\beta^* \gamma}{|\beta|} \frac{\hbar}{\text{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(2j-1)!} \left(\frac{|\beta|^2 + |\gamma|^2}{|\beta|} \right)^{2j-1} \\
&= \frac{\beta^* |\beta| \gamma}{\beta^* \beta} \frac{\hbar}{\text{ch} \xi} \text{sh} \xi = \hbar |\beta| \frac{\gamma}{\beta} \text{th} \xi.
\end{aligned}$$

Slično se pokazuje da je

$$\langle J_- \rangle_{|\beta, \gamma\rangle} = \hbar |\beta| \frac{\gamma^*}{\beta^*} \text{th} \xi,$$

pa je

$$\langle J_x \rangle_{|\beta, \gamma\rangle} = \frac{1}{2} \hbar |\beta| \operatorname{th} \xi \left(\frac{\gamma}{\beta} + \frac{\gamma^*}{\beta^*} \right) = \hbar |\beta| \operatorname{Re} \left(\frac{\gamma}{\beta} \right) \operatorname{th} \xi,$$

odnosno

$$\langle J_y \rangle_{|\beta, \gamma\rangle} = \frac{\langle J_+ \rangle - \langle J_- \rangle}{2i} = \frac{1}{2i} \hbar |\beta| \operatorname{th} \xi \left(\frac{\gamma}{\beta} - \frac{\gamma^*}{\beta^*} \right) = \hbar |\beta| \operatorname{Im} \left(\frac{\gamma}{\beta} \right) \operatorname{th} \xi,$$

Očekivana vrednost z -komponente momenta impulsa je

$$\begin{aligned} \langle J_z \rangle_{|\beta, \gamma\rangle} &= \frac{1}{\operatorname{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^{j-1} \sum_{j'=0}^{\infty} \sum_{m'=-j'}^{j'} \frac{(\beta^*)^{m'} (\gamma^*)^{j'-m'} \beta^m \gamma^{j-m} m \hbar \overbrace{\langle j', m' | j, m \rangle}^{\delta_{jj'} \delta_{mm'}}}{\sqrt{(j'+m')! (j'-m')! (j+m)! (j-m)!}} \\ &= \frac{\hbar}{\operatorname{ch} \xi} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j m \frac{|\beta|^{2m} |\gamma|^{2(j-m)}}{(j+m)! (j-m)!}. \end{aligned}$$

Razmotrimo sumu

$$S(|\beta|, |\gamma|) = \hbar \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \frac{|\beta|^{2m} |\gamma|^{2(j-m)}}{(j+m)! (j-m)!}.$$

Ovu sumu smo već izračunali (prilikom određivanja normalizacije) i ona je

$$S(|\beta|, |\gamma|) = \operatorname{ch} \xi = \operatorname{ch} \frac{|\beta|^2 + |\gamma|^2}{|\beta|}.$$

Ako potražimo izvod gornje sume po $|\beta|$ dobijamo

$$\frac{\partial S(|\beta|, |\gamma|)}{\partial |\beta|} = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \frac{2m |\beta|^{2m-1} |\gamma|^{2(j-m)}}{(j+m)! (j-m)!}$$

pa je suma koju imamo u izrazu za $\langle J_z \rangle$ jednaka

$$\sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \frac{m |\beta|^{2m} |\gamma|^{2(j-m)}}{(j+m)! (j-m)!} = \frac{|\beta|}{2} \frac{\partial S(|\beta|, |\gamma|)}{\partial |\beta|},$$

iz čega sledi

$$\langle J_z \rangle_{|\beta, \gamma\rangle} = \frac{\hbar}{\operatorname{ch} \xi} \frac{|\beta|}{2} \frac{\partial}{\partial |\beta|} \operatorname{ch} \frac{|\beta|^2 + |\gamma|^2}{|\beta|} = \hbar \frac{|\beta|^2 + |\gamma|^2}{2|\beta|} \operatorname{th} \xi.$$

5.26 Skalarni proizvod u prostoru funkcija koji obrazuju polinomi z^k stepena $0 \leq k \leq 2j$ je

$$\langle \psi | \chi \rangle = \frac{2j+1}{\pi} \int \frac{\psi(z)^* \chi(z)}{(1+|z|^2)^{2j+2}} d^2 z.$$

a) Razmotrimo skalarni proizvod dva polinoma $\varphi_m(z) = C_{jm} z^{j+m}$ i $\varphi_{m'}(z) = C_{jm'} z^{j+m'}$:

$$\langle \varphi_{m'} | \varphi_m \rangle = \frac{2j+1}{\pi} \int \frac{C_{jm}^* C_{jm'} (z^*)^{j+m} z^{j+m'}}{(1+|z|^2)^{2j+2}} dz.$$

Napišimo kompleksan broj u polarnoj formi $z = \rho e^{i\varphi}$. Tad je $dz = \rho d\rho d\varphi$, pa je gornji integral

$$\langle \varphi_{m'} | \varphi_m \rangle = \frac{2j+1}{\pi} C_{jm}^* C_{jm'} \int_0^{\infty} d\rho \frac{\rho^{2j+m+m'+1}}{(1+\rho^2)^{2j+2}} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m'-m)\varphi}}_0 = 0.$$

Dakle, polinomi različitog stepena su u odnosu na dati skalarni proizvod međusobno ortogonalni. Potrebno je da odredimo konstante C_{jm} tako da budu i normirani, odnosno da važi $\langle \varphi_m | \varphi_m \rangle = 1$. Pošto je

$$\langle \varphi_m | \varphi_m \rangle = \frac{2j+1}{\pi} |C_{jm}|^2 \int_0^\infty d\rho \frac{\rho^{2j+2m+1}}{(1+\rho^2)^{2j+2}} \int_0^{2\pi} d\varphi$$

integral po ρ se smenom $x = \rho^2$ svodi na beta-funkciju čije vrednosti znamo

$$B(a, b) = \int_0^\infty \frac{x^{a-1}}{(1+x)^{a+b}} = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)}.$$

Dakle, dalje imamo da je

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m | \varphi_m \rangle &= (2j+1) |C_{jm}|^2 \int_0^\infty dx \frac{x^{j+m}}{(1+x)^{2j+2}} \\ &= (2j+1) |C_{jm}|^2 B(j+m+1, j-m+1) \\ &= (2j+1) |C_{jm}|^2 \frac{\Gamma(j+m+1)\Gamma(j-m+1)}{\Gamma(2j+2)} \\ &= (2j+1) |C_{jm}|^2 \frac{(j+m)!(j-m)!}{(2j+1)!} \end{aligned}$$

tako da je

$$C_{jm} = \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}}.$$

- b)** Da bi ovo bila dobra reprezentacija rotacione grupe potrebno je bude ispunjeno (u ovom zadatku radimo u sistemu jedinica u kome je $\hbar = 1$):

$$J_3 \varphi_m = m \varphi_m,$$

$$J_- \varphi_m = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \varphi_{m-1},$$

$$J_+ \varphi_m = \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \varphi_{m+1}.$$

U prethodnom delu zadatka smo dobili da je

$$\varphi_m = \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} z^{j+m}.$$

Prva osobina se lako proverava

$$\begin{aligned} J_3 \varphi_m &= \left(z \frac{d}{dz} - j \right) \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} z^{j+m} \\ &= \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} (j+m-j) z^{j+m} = m \varphi_m. \checkmark \end{aligned}$$

Sledeća osobina se proverava na sličan način

$$J_- \varphi_m = \frac{d}{dz} \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} z^{j+m}$$

$$\begin{aligned}
&= \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} (j+m)z^{j+m-1} \\
&= \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m-1)!(j-m)!}} \sqrt{j+m} \varphi_{m-1} \sqrt{\frac{(j+m-1)!(j-m+1)!}{(2j)!}} \\
&= \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \varphi_{m-1}. \checkmark
\end{aligned}$$

Treću osobinu pokazujemo na sledeći način:

$$\begin{aligned}
J_+ \varphi_m &= \left(-z^2 \frac{d}{dz} + 2jz \right) \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} z^{j+m} \\
&= \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} (-(j+m) + 2j) z^{j+m+1} \\
&= \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m-1)!}} \sqrt{j-m} \varphi_{m+1} \sqrt{\frac{(j+m+1)!(j-m-1)!}{(2j)!}} \\
&= \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \varphi_{m+1}. \checkmark
\end{aligned}$$

- c) Da bismo dokazali da je J_3 hermitski operator potrebno je pokazati da važi jednakost $\langle J_3 \psi | \chi \rangle = \langle \psi | J_3 \chi \rangle$. Videli smo da vektori $|\varphi_m\rangle$ čine ortonormiran bazis ($m = 0, 1, \dots, 2j$). To znači da se svaki vektor u prostoru stanja može napisati kao linearna kombinacija bazisnih vektora

$$|\chi\rangle = \sum_{m=0}^{2j} \chi_m |\varphi_m\rangle, \quad |\psi\rangle = \sum_{m=0}^{2j} \psi_m |\varphi_m\rangle.$$

Operator J_3 na vektor deluje na sledeći način

$$J_3 |\chi\rangle = J_3 \sum_{m=0}^{2j} \chi_m |\varphi_m\rangle = \sum_{m=0}^{2j} \chi_m m |\varphi_m\rangle,$$

pa je

$$\langle J_3 \psi | \chi \rangle = \sum_{m=0}^{2j} \sum_{m'=0}^{2j} \langle \varphi_{m'} | \psi_{m'}^* m' \chi_m |\varphi_m\rangle = \sum_{m=0}^{2j} \sum_{m'=0}^{2j} \psi_{m'}^* m' \chi_m \delta_{mm'} = \sum_{m=0}^{2j} m \psi_m^* \chi_m.$$

S druge strane imamo da je

$$\langle \psi | J_3 \chi \rangle = \sum_{m=0}^{2j} \sum_{m'=0}^{2j} \langle \varphi_{m'} | \psi_{m'}^* m \chi_m |\varphi_m\rangle = \sum_{m=0}^{2j} \sum_{m'=0}^{2j} \psi_{m'}^* m \chi_m \delta_{mm'} = \sum_{m=0}^{2j} m \psi_m^* \chi_m,$$

tako da je J_3 hermitski operator. Osobina $J_-^\dagger = J_+$ se dokazuje na sličan način, koristeći deo zadatka pod b). Treba pokazati da je $\langle \psi | J_- \chi \rangle = \langle J_+ \psi | \chi \rangle$. Leva strana je

$$\begin{aligned}
\langle \psi | J_- \chi \rangle &= \sum_{m=0}^{2j} \sum_{m'=0}^{2j} \langle \varphi_{m'} | \psi_{m'}^* \chi_{m'} \sqrt{(j+m')(j-m'+1)} |\varphi_{m'-1}\rangle \\
&= \sum_{m=0}^{2j} \sum_{m'=0}^{2j} \psi_{m'}^* \chi_{m'} \sqrt{(j+m')(j-m'+1)} \delta_{m,m'-1} \\
&= \sum_{m=0}^{2j} \psi_m^* \chi_{m+1} \sqrt{(j+m+1)(j-m)},
\end{aligned}$$

dok je desna strana jednačine

$$\begin{aligned}\langle J_+ \psi | \chi \rangle &= \sum_{m=0}^{2j} \sum_{m'=0}^{2j} \langle \varphi_{m+1} | \psi_m^* \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \chi_{m'} | \varphi_{m'} \rangle \\ &= \sum_{m=0}^{2j} \sum_{m'=0}^{2j} \psi_m^* \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \chi_{m'} \delta_{m+1, m'} \\ &= \sum_{m=0}^{2j} \psi_m^* \chi_{m+1} \sqrt{(j+m+1)(j-m)},\end{aligned}$$

čime smo pokazali tražene osobine.

5.27 Pošto je operator ukupnog momenta impulsa

$$\vec{L} = \sum_{k=1}^{2l+1} \vec{L}_k$$

(indeks k prebrojava elektrone) važi da je, za svaku izmenu i -tog i j -tog elektrona

$$[\vec{L}, P_{ij}] = 0,$$

pa se L^2 i L_z mogu dijagonalizovati istovremeno sa operatorom antisimetrizacije A . Pošto je cela ljuska popunjena, ugaoni deo talasne funkcije stanja svih elektrona $|\psi\rangle$ je Slater-ova determinanta obrazovana vektorima $|l, m\rangle$ za sve $m = -l, \dots, l$. Ovo stanje je svojstveno stanje od L_z sa svojstvenom vrednošću $\sum_{m=-l}^l m = 0$. Međutim, u tom stanju je i svojstvena vrednost od kvadrata momenta impulsa L^2 nula, što se vidi iz sledećeg. Imamo da je

$$L^2 = L_z^2 + \hbar L_z + L_- L_+,$$

gde i za operatore podizanja i spuštanja važi

$$L_- = \sum_k (L_k)_-, \quad L_+ = \sum_k (L_k)_+.$$

Pri delovanju na stanje $|\psi\rangle$ prva dva sabirka iz L^2 daju nulu jer je $L_z |\psi\rangle = 0$. Isto tako i treći je 0 jer u svakom sabirku Slater-ove determinante postoji, za neko k , jedno od faktor-stanja $|l, l\rangle_k$ koje se anulira pri delovanju odgovarajućeg operatora podizanja $(L_k)_+ |l, l\rangle_k = 0$ zbog čega je $L_+ |\psi\rangle = 0$ tako da je i

$$L^2 |\psi\rangle = 0.$$

5.28 Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti $\langle l_1, m_1, l_2, m_2 | j, m_j, l_1, l_2 \rangle$ su brojevi koji se pojavljuju u razvoju svojstvenih vektora operatora J^2, J_z, L_1^2 i L_2^2 preko svojstvenih stanja L_1^2, L_{1z}, L_2^2 i L_{2z} , pri čemu je

$$\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2.$$

Ako su $l_1 = 1$ i $l_2 = 1/2$ onda je (videti formulu (5.142))

$$j = \frac{3}{2}, \quad j = \frac{1}{2}.$$

Stanje maksimalnog momenta impulsa je jedinstveno i u jednom bazu je $|3/2, 3/2, 1, 1/2\rangle$ dok je u drugom $|1, 1, 1/2, 1/2\rangle$. Pošto je

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle = \left| 1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \Rightarrow \left\langle 1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle = 1.\right.$$

Delovanjem operatora J_- na stanje maksimalnog momenta impulsa u jednom bazisu dobijamo

$$J_- \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{\left(\frac{3}{2} + \frac{3}{2}\right) \left(\frac{3}{2} - \frac{3}{2} + 1\right)} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} - 1, 1, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{3} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle,$$

dok je u drugom bazisu ovaj izraz jednak

$$\begin{aligned} J_- \left| 1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= (J_{1-} + J_{2-}) \left| 1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \hbar \left(\sqrt{(1+1)(1-1+1)} \left| 1, 1-1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} \left| 1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 1 \right\rangle \right) \\ &= \hbar \left(\sqrt{2} \left| 1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| 1, 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right), \end{aligned}$$

pa iz jednakosti

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 1, 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle,$$

dobijamo još dva Clebsch-Gordan-ova koeficijenta

$$\left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \left| 1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad \left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \left| 1, 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}.$$

Od stanja $|1, 0, 1/2, 1/2\rangle$ i $|1, 1, 1/2, -1/2\rangle$ može da se napravi još jedno stanje koje ima $m_j = m_1 + m_2 = 1/2$. To stanje ima $j = 1/2$ i ortogonalno je na $|3/2, 1/2, 1, 1/2\rangle$. Ako reči prevedemo u formule imamo

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle = \alpha \left| 1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| 1, 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad \alpha^2 + \beta^2 = 1, \quad \alpha \sqrt{\frac{2}{3}} + \beta \sqrt{\frac{1}{3}} = 0,$$

iz čega se nalaze α i β (Ovde imamo slobodu da izaberemo znak + ispred jednog od dva stanja, a konvencija je da ga biramo kod onog stanja koje ima pozitivno m .) tako da je

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle,$$

pa su još dva Clebsch-Gordan-ova koeficijenta

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \left| 1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}, \quad \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \left| 1, 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}}.$$

Preostale Clebsch-Gordan-ove koeficijente nalazimo iz formule

$$\langle l_1, -m_1, l_2, -m_2 | j, -m_j, l_1, l_2 \rangle = (-1)^{l_1+l_2-j} \langle l_1, m_1, l_2, m_2 | j, m_j, l_1, l_2 \rangle.$$

Clebsch-Gordan-ove koeficijente često nalazimo u tabelama (jedan primer je dat u tabeli 5.1). U njima se ne pišu korenovi, tako da na primer $-2/3$ znači da je vrednost odgovarajućeg Clebsch-Gordan-ovog koeficijenta $-\sqrt{2/3}$.

5.29 Hamiltonijan elektrona u atomu vodonika je

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r},$$

dok su komponente Laplace-Runge-Lenz-ovog vektora

$$A_i = \frac{1}{2m} \varepsilon_{ijk} (p_j L_k + L_k p_j) - Ze^2 \frac{x_i}{r}.$$

				3/2				
				3/2	3/2	1/2		
1 × 1/2				3/2	1/2			
+1	+1/2	1	1/2	1/2				
	+1	-1/2	1/3	2/3	3/2	1/2		
	0	1/2	2/3	-1/3	-1/2	-1/2		
			0	-1/2	2/3	1/3	3/2	
			-1	+1/2	1/3	-2/3	-3/2	
					-1	-1/2	1	

Tabela 5.1: Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti za $l_1 = 1$ i $l_2 = 1/2$.

a) Komutator Laplace-Runge-Lenz-ovog vektora i hamiltonijana je

$$\begin{aligned} [A_i, H] &= \left[\frac{1}{2m} \varepsilon_{ijk} (p_j L_k + L_k p_j) - \frac{Z e^2}{r} x_i, \frac{1}{2m} p^2 - \frac{Z e^2}{r} \right] \\ &= -\frac{Z e^2}{2m} \varepsilon_{ijk} \left[p_j L_k, \frac{1}{r} \right] - \frac{Z e^2}{2m} \varepsilon_{ijk} \left[L_k p_j, \frac{1}{r} \right] - \frac{Z e^2}{2m} \left[\frac{x_i}{r}, p^2 \right]. \end{aligned}$$

Ovde nismo pisali sve komutatori koji su jednaki 0. Prvi komutator je

$$\left[p_j L_k, \frac{1}{r} \right] = \left[p_j, \frac{1}{r} \right] L_k = i\hbar \frac{x_j}{r^3} L_k,$$

jer su $[L_k, r^{-1}] = 0$ i $[p_j, r^{-1}] = i\hbar x_j / r^3$. Drugi komutator se dobija na isti način

$$\left[L_k p_j, \frac{1}{r} \right] = L_k \left[p_j, \frac{1}{r} \right] = i\hbar L_k \frac{x_j}{r^3},$$

dok je treći komutator

$$\left[\frac{x_i}{r}, p_j p_j \right] = p_j \left[\frac{x_i}{r}, p_j \right] + \left[\frac{x_i}{r}, p_j \right] p_j = i\hbar \left(p_i \frac{1}{r} + \frac{1}{r} p_i - p_j \frac{x_i x_j}{r^3} - \frac{x_i x_j}{r^3} p_j \right),$$

pošto je

$$\begin{aligned} \left[\frac{x_i}{r}, p_j \right] f &= \frac{x_i}{r} (-i\hbar) \frac{\partial f}{\partial x_j} - (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{x_i}{r} f \right) \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{x_i}{r} \right) f = i\hbar \left(\delta_{ij} \frac{1}{r} - \frac{x_i x_j}{r^3} \right) f, \end{aligned}$$

iz čega sledi operatorska jednakost

$$\left[\frac{x_i}{r}, p_j \right] = i\hbar \left(\delta_{ij} \frac{1}{r} - \frac{x_i x_j}{r^3} \right).$$

Dakle, možemo primetiti da je traženi komutator

$$\begin{aligned} [A_i, H] &= -i\hbar \frac{Z e^2}{2m} \left(\varepsilon_{ijk} \frac{x_j}{r^3} L_k + \varepsilon_{ijk} L_k \frac{x_j}{r^3} + p_j \frac{1}{r} + \frac{1}{r} p_i - p_i \frac{x_i x_j}{r^3} - \frac{x_i x_j}{r^3} p_j \right) \\ &= -i\hbar \frac{Z e^2}{2m} \left(\varepsilon_{ijk} \frac{x_j}{r^3} \varepsilon_{klm} x_l p_m + \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} p_m x_l \frac{x_j}{r^3} \right. \\ &\quad \left. + p_i \frac{1}{r} + \frac{1}{r} p_i - p_j \frac{x_i x_j}{r^3} - \frac{x_i x_j}{r^3} p_j \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -i\hbar \frac{Ze^2}{2m} \left((\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl}) \frac{x_j}{r^3} x_l p_m + (\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl}) p_m x_l \frac{x_j}{r^3} \right. \\
&\quad \left. + p_j \frac{1}{r} + \frac{1}{r} p_i - p_i \frac{x_i x_j}{r^3} - \frac{x_i x_j}{r^3} p_j \right) \\
&= -i\hbar \frac{Ze^2}{2m} \left(\frac{x_j}{r^3} x_i p_j - \frac{1}{r} p_i + p_j x_i \frac{x_j}{r^3} - p_i \frac{1}{r} + p_j \frac{1}{r} + \frac{1}{r} p_i - p_i \frac{x_i x_j}{r^3} - \frac{x_i x_j}{r^3} p_j \right) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

b) Tražena osobina se pokazuje sasvim jednostavno

$$\vec{L} \cdot \vec{A} = L_i A_i = L_i \left(\frac{1}{2m} \varepsilon_{ijk} (p_j L_k + L_k p_j) - Ze^2 \frac{x_i}{r} \right) = -Ze^2 \varepsilon_{ijk} x_j p_k x_i \frac{1}{r} = 0$$

jer je proizvod simetričnog tenzora i ε -simbola jednak 0.

c) Napišimo Laplace-Runge-Lenz-ov vektor na sledeći način

$$A_i = B_i - Ze^2 \frac{x_i}{r},$$

gde je $B_i = \varepsilon_{ijk} (p_j L_k + L_k p_j) / (2m)$. Ova veličina se može napisati na dva načina

$$\begin{aligned}
B_i &= \frac{1}{2m} \varepsilon_{ijk} (p_j L_k + L_k p_j) = \frac{1}{2m} \varepsilon_{ijk} (2p_j L_k + \underbrace{[L_k, p_j]}_{i\hbar \varepsilon_{kjl} p_l}) = \frac{1}{m} \varepsilon_{ijk} p_j L_k - \frac{i\hbar}{m} p_i \\
&= \frac{1}{2m} \varepsilon_{ijk} (\underbrace{[p_j, L_k]}_{\hbar \varepsilon_{jkl} p_l} + 2L_k p_j) = \frac{i\hbar}{m} p_i + \frac{1}{m} \varepsilon_{ijk} L_k p_j.
\end{aligned}$$

Sad imamo

$$A^2 = \left(B_i - Ze^2 \frac{x_i}{r} \right) \left(B_i - Ze^2 \frac{x_i}{r} \right) = B_i B_i - Ze^2 \left(B_i x_i \frac{1}{r} + \frac{1}{r} x_i B_i \right) + Z^2 e^4 \frac{1}{r^2} \overbrace{x_i x_i}^{r^2}.$$

Izračunajmo najpre prvi sabirak

$$\begin{aligned}
B_i B_i &= \frac{1}{m^2} \left(\varepsilon_{ijk} L_k p_j + i\hbar p_i \right) \left(\varepsilon_{imn} p_m L_n - i\hbar p_i \right) \\
&= \frac{1}{m^2} \left(\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{imn} L_k p_j p_m L_n - i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k p_j p_i + i\hbar \varepsilon_{imn} p_i p_m L_n + \hbar^2 p^2 \right) \\
&= \frac{1}{m^2} \left((\delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km}) L_k p_j p_m L_n + \hbar^2 p^2 \right) \\
&= \frac{1}{m^2} \left(p^2 L^2 + \underbrace{(\vec{L} \cdot \vec{p})^2}_0 + \hbar^2 p^2 \right) \\
&= \frac{p^2}{m^2} (L^2 + \hbar^2).
\end{aligned}$$

U sledeće sabirku od A^2 pojavljuje se

$$\begin{aligned}
B_i x_i \frac{1}{r} + \frac{1}{r} x_i B_i &= \frac{1}{m} \left((i\hbar p_i + \varepsilon_{ijk} L_k p_j) x_i \frac{1}{r} + \frac{1}{r} x_i (\varepsilon_{ijk} p_j L_k - i\hbar p_i) \right) \\
&= \frac{1}{m} \left(i\hbar \left(p_i \frac{x_i}{r} - \frac{x_i}{r} p_i \right) + L_k \underbrace{\varepsilon_{ijk} p_j x_i}_{L_k} \frac{1}{r} + \frac{1}{r} \underbrace{\varepsilon_{ijk} x_i p_j}_{L_k} L_k \right)
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{m} \left(i\hbar \left[p_i, \frac{x_i}{r} \right] + 2 \frac{1}{r} L^2 \right).$$

Pošto je

$$\left[p_i, \frac{x_i}{r} \right] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{x_i}{r} = -i\hbar \frac{\frac{\partial x_i}{\partial x_i} r - x_i \frac{\partial r}{\partial x_i}}{r^2} = -i\hbar \frac{\delta_{ii} r - x_i \frac{x_i}{r}}{r^2} = -i\hbar \frac{3r - r}{r^2} = -2i\hbar \frac{1}{r},$$

imamo da je

$$B_i x_i \frac{1}{r} + \frac{1}{r} x_i B_i = \frac{1}{m} \left(2 \frac{\hbar^2}{r} + 2 \frac{1}{r} L^2 \right) = \frac{1}{m} \frac{2}{r} (L^2 + \hbar^2)$$

pa je konačno

$$A^2 = \frac{p^2}{m^2} (L^2 + \hbar^2) - \frac{2Ze^2}{mr} (L^2 + \hbar^2) + Z^2 e^4 = \frac{2}{m} \underbrace{\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \right)}_H (L^2 + \hbar^2) + Z^2 e^4,$$

što je i trebalo pokazati.

5.30 Osnovne komutacione relacije SO(1,2) grupe su

$$[M_1, M_2] = -iM_3, \quad [M_2, M_3] = iM_1, \quad [M_3, M_1] = iM_2.$$

a) Potražimo komutator operatora M^2 sa M_1 (analogno je i sa M_2)

$$\begin{aligned} [M^2, M_1] &= [M_1^2 + M_2^2 - M_3^2, M_1] = [M_2^2, M_1] - [M_3^2, M_1] \\ &= M_2 [M_2, M_1] + [M_2, M_1] M_2 - M_3 [M_3, M_1] - [M_3, M_1] M_3 \\ &= iM_2 M_3 + iM_3 M_2 - iM_3 M_2 - iM_2 M_3 = 0. \quad \checkmark \end{aligned}$$

Slično tome je i

$$\begin{aligned} [M^2, M_3] &= [M_1^2 + M_2^2, M_3] = [M_1^2, M_3] + [M_2^2, M_3] \\ &= M_1 [M_1, M_3] + [M_1, M_3] M_1 + M_2 [M_2, M_3] + [M_2, M_3] M_2 \\ &= -iM_1 M_2 - iM_2 M_1 + iM_2 M_1 + iM_1 M_2 = 0. \quad \checkmark \end{aligned}$$

Dalje treba odrediti komutatore

$$\begin{aligned} [M_3, M_{\pm}] &= \frac{1}{\sqrt{2}} [M_3, iM_1 \mp M_2] = \frac{i}{\sqrt{2}} [M_3, M_1] \mp \frac{1}{\sqrt{2}} [M_3, M_2] = \frac{-M_2 \pm iM_1}{\sqrt{2}} \\ &= \pm \frac{iM_1 \mp M_2}{\sqrt{2}} = \pm M_{\pm}, \quad \checkmark \end{aligned}$$

i na kraju

$$[M_+, M_-] = \frac{1}{2} [iM_1 - M_2, iM_1 + M_2] = \frac{i}{2} [M_1, M_2] - \frac{i}{2} [M_2, M_1] = M_3. \quad \checkmark$$

b) Generatori M_i su hermitski $M_i^\dagger = M_i$, pa se lako polazuje da je

$$M_+^\dagger = \frac{(iM_1 - M_2)^\dagger}{\sqrt{2}} = \frac{-iM_1 - M_2}{\sqrt{2}} = -M_- \quad \checkmark$$

Da bismo dobili i drugu formulu, potražimo

$$M_{\pm} M_{\mp} = \frac{1}{2} (iM_1 \mp M_2)(iM_1 \pm M_2) = \frac{1}{2} (-M_1^2 \pm iM_1 M_2 \mp iM_2 M_1 - M_2^2),$$

pa je

$$M_+ M_- + M_- M_+ = -M_1^2 - M_2^2,$$

odnosno

$$M^2 = M_1^2 + M_2^2 - M_3^2 = -M_+ M_- - M_- M_+ - M_3^2.$$

c) Koristeći prethodni zadatak imamo da je

$$M_+ M_- = \frac{1}{2}(-M_1^2 - M_2^2 + i[M_1, M_2]) = -\frac{1}{2}(M^2 + M_3^2 + M_3),$$

ili

$$M_- M_+ = \frac{1}{2}(-M_1^2 - M_2^2 - i[M_1, M_2]) = -\frac{1}{2}(M^2 + M_3^2 - M_3).$$

d) Videli smo da M^2 komutira sa svim generatorima grupe $SO(1,2)$, pa je on Casimir-ov operator. Ireducibilne reprezentacije označavaćemo svojstvenim vrednostima Casimir-ovog operatora i još jednog generatora. Biramo da je to M_3 , tako da rešavamo zajednički svojstveni problem od M^2 i M_3 . Neka su $|X, a\rangle$ svojstveni vektori koji su svojstveni za M^2 i M_3

$$M^2 |X, a\rangle = X |X, a\rangle, \quad M_3 |X, a\rangle = a |X, a\rangle.$$

Razmotrimo vektor $X_+ |X, a\rangle$. On je svojstveni vektor od M_3 što vidimo iz

$$\begin{aligned} M_3 M_+ |X, a\rangle &= ([M_3, M_+] + M_+ M_3) |X, a\rangle = (M_+ + M_+ M_3) |X, a\rangle \\ &= M_+ |X, a\rangle + a M_+ |X, a\rangle = (a+1) M_+ |X, a\rangle \end{aligned}$$

i odgovarajuća svojstvena vrednost je $a+1$. Isto tako, može se pokazati da je i $M_- |X, a\rangle$ svojstveni vektor za operator M_3 sa svojstvenom vrednošću $a-1$. Ovo je isto kao u slučaju $SO(3)$ grupe. Pošto M_\pm komutiraju sa M^2 , onda je

$$M^2 M_\pm |X, a\rangle = M_\pm M^2 |X, a\rangle = X M_\pm |X, a\rangle$$

što znači da je $|X, a \pm 1\rangle \sim M_\pm |X, a\rangle$. Potražimo koji uslov treba da bude zadovoljen da bi $|X, a \pm 1\rangle$ bila stanja pozitivne norme. Norma ovih stanja je

$$\langle X, a \pm 1 | X, a \pm 1 \rangle = \langle X, a | (-M_\mp) M_\pm |X, a\rangle = \frac{1}{2} \langle X, a | M^2 + M_3^2 \pm M_3 |X, a\rangle = \frac{X + a^2 \pm a}{2},$$

i ona će biti pozitivna ako je

$$X + a(a \pm 1) > 0.$$

Ovi uslovi su bitno različiti od uslova koji se dobijaju u slučaju $SO(3)$ grupe (jednačine (5.70) i (5.72)) i zbog te razlike ireducibilne reprezentacije $SO(1,2)$ se razlikuju od odgovarajućih reprezentacija rotacione grupe. Videli smo da se delovanjem operatora M_\pm kvantni broj a povećava i smanjuje za 1. Zato se dozvoljene vrednosti od a međusobno razlikuju za jedan. Ali, za razliku od rotacione grupe, ovde je ograničenje na svojstvene vrednosti od M^2 i M_3 drugačije, pa su mogući sledeći slučajevi:

– *Kontinualni niz stanja:*

* ako uzmemo da je

$$X > 0, \quad a = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Ova reprezentacija nije ograničena ni sa jedne strane i obeležava se sa C_X^0 .

* se dobija i za:

$$X > \frac{1}{4}, \quad a = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots$$

dobijamo još jednu neograničenu reprezentaciju koju ćemo označiti sa $C_X^{1/2}$.

– *Diskretan niz stanja:*

* ako je

$$X = k(1 - k)$$

gde je $k = 1/2, 1, 3/2, \dots$ i

$$a = k, k + 1, k + 2, \dots$$

dobijamo reprezentaciju koja je ograničena odozdo D_k^+ .

* ukoliko je

$$X = k(1 - k)$$

gde je $k = 1/2, 1, 3/2, \dots$ ali sada uzmemo da je

$$a = -k, -(k + 1), -(k + 2), \dots$$

dobijamo reprezentaciju koja je ograničena odozgo D_k^- .

- e) U ovom delu zadatka treba da odredimo ireducibilnu reprezentaciju za koju je $X = k(k - 1) = 0$. Za $k > 0$ ova jednačina ima samo jedno rešenje $k = 1$. U prethodnom delu zadatka smo videli da za diskretan niz stanja postoje dve reprezentacije, opredelićemo se za onu kod koje su stanja ograničena odozdo, tako da je $a = 1, 2, 3, \dots$. Dakle, bazisni vektori ove reprezentacije su $|X = 0, a\rangle$ i njih ćemo reprezentovati beskonačnim kolonama tako da je

$$|X = 0, a = 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |X = 0, a = 2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |X = 0, a = 3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \dots$$

Operator M_3 je dijagonalan u ovom bazisu. Iz $M_3|X, a\rangle = a|X, a\rangle$ dobijamo da je prva kolona matrice M_3 vektor $|X = 0, a = 1\rangle$, druga je $2|X = 0, a = 2\rangle \dots$ pa je

$$M_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Na osnovu razmatranja iz prethodnog dela zadatka lako se pokazuje da je

$$M_+|X, a\rangle = \sqrt{\frac{X + a(a + 1)}{2}}|X, a + 1\rangle.$$

U našem slučaju je $X = 0$, pa imamo

$$M_+|0, a\rangle = \sqrt{\frac{a(a + 1)}{2}}|0, a + 1\rangle,$$

tako da su

$$M_+|0,1\rangle = |0,2\rangle, \quad M_+|0,2\rangle = \sqrt{3}|0,3\rangle, \quad M_+|0,3\rangle = \sqrt{6}|0,4\rangle, \quad M_+|0,4\rangle = \sqrt{10}|0,5\rangle, \dots$$

pa je u ovoj reprezentaciji

$$M_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{10} & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Matricu M_- nalazimo iz

$$M_- = -M_+^\dagger = - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{10} & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

Matrice koje reprezentuju generatore M_1 i M_2 dobijamo iz

$$M_1 = -\frac{i}{\sqrt{2}}(M_+ + M_-), \quad M_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(M_+ - M_-),$$

što daje

$$M_1 = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & -\sqrt{3} & 0 & \sqrt{6} & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & \sqrt{10} & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{10} & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix},$$

i

$$M_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{6} & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & \sqrt{10} & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{10} & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Da bismo proverili da li je ova reprezentacija dobra, proverićemo neke relacije koje treba da zadovoljavaju ove matrice. Pokažimo da u ovoj reprezentaciji komutatori između generatora ispravno reprezentuju osnovne komutacione relacije

$$[M_1, M_2] = M_1 M_2 - M_2 M_1$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ 0 & -\sqrt{3} & 0 & \sqrt{6} & \ddots \\ 0 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{6} & \ddots \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \\
&+ \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{6} & \ddots \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ 0 & -\sqrt{3} & 0 & \sqrt{6} & \ddots \\ 0 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \\
&= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{16} & \ddots \\ -\sqrt{3} & 0 & 3 & 0 & \ddots \\ 0 & -\sqrt{18} & 0 & 4 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} + \frac{i}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & -2 & 0 & \sqrt{16} & \ddots \\ -\sqrt{3} & 0 & -3 & 0 & \ddots \\ 0 & -\sqrt{18} & 0 & -4 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \\
&= -i \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} = -iM_3. \quad \checkmark
\end{aligned}$$

Slično tome je

$$\begin{aligned}
[M_2, M_3] &= M_2M_3 - M_3M_2 \\
&= -\frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{6} & \ddots \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \\
&+ \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{6} & \ddots \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 3\sqrt{3} & 0 & \ddots \\ 0 & 2\sqrt{3} & 0 & 4\sqrt{6} & \ddots \\ 0 & 0 & 4\sqrt{6} & 4 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} + \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 2 & 0 & 2\sqrt{3} & 0 & \ddots \\ 0 & 3\sqrt{3} & 0 & 3\sqrt{6} & \ddots \\ 0 & 0 & 3\sqrt{6} & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \\
&= i \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ 0 & -\sqrt{3} & 0 & \sqrt{6} & \ddots \\ 0 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} = iM_1, \checkmark
\end{aligned}$$

a tako se proverava i da je $[M_3, M_1] = iM_2$. Još treba videti čemu je jednak Casimir-ov operator:

$$\begin{aligned}
M^2 &= M_1^2 + M_2^2 - M_3^2 \\
&= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & -4 & 0 & \sqrt{18} & \ddots \\ \sqrt{3} & 0 & -9 & 0 & \ddots \\ 0 & \sqrt{18} & 0 & -16 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 4 & 0 & \sqrt{18} & \ddots \\ \sqrt{3} & 0 & 9 & 0 & \ddots \\ 0 & \sqrt{18} & 0 & 16 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \\
&\quad - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 4 & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 9 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 16 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} = 0, \checkmark
\end{aligned}$$

što i očekujemo jer sva stanja u ovoj reprezentaciji imaju svojstvenu vrednost Casimir-ovog operatora 0.

5.31 Za $SO(1, 3)$ grupu komutacione relacije su

$$[M_{\alpha\beta}, M_{\gamma\delta}] = i(\eta_{\alpha\gamma}M_{\beta\delta} - \eta_{\alpha\delta}M_{\beta\gamma} - \eta_{\beta\gamma}M_{\alpha\delta} + \eta_{\beta\delta}M_{\alpha\gamma}),$$

a metrika je $\eta_{\alpha\beta} = \text{diag}(-1, 1, 1, 1)$. Naš zadatak je da pokažemo da su $C = M_{\alpha\beta}M^{\alpha\beta}$ i $\tilde{C} = \epsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}M^{\alpha\beta}M^{\gamma\delta}$ Casimir-ovi operatori, što znači da komutiraju sa svim generatorima $M_{\alpha\beta}$. Ponađimo najpre komutator

$$\begin{aligned}
[C, M_{\gamma\delta}] &= [M_{\alpha\beta}M^{\alpha\beta}, M_{\gamma\delta}] \\
&= [M_{\alpha\beta}, M_{\gamma\delta}]M^{\alpha\beta} + M_{\alpha\beta}[M^{\alpha\beta}, M_{\gamma\delta}] \\
&= [M_{\alpha\beta}, M_{\gamma\delta}]M^{\alpha\beta} + M^{\alpha\beta}[M_{\alpha\beta}, M_{\gamma\delta}] \\
&= i(\eta_{\alpha\gamma}M_{\beta\delta} - \eta_{\alpha\delta}M_{\beta\gamma} - \eta_{\beta\gamma}M_{\alpha\delta} + \eta_{\beta\delta}M_{\alpha\gamma})M^{\alpha\beta} \\
&\quad + iM^{\alpha\beta}(\eta_{\alpha\gamma}M_{\beta\delta} - \eta_{\alpha\delta}M_{\beta\gamma} - \eta_{\beta\gamma}M_{\alpha\delta} + \eta_{\beta\delta}M_{\alpha\gamma})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= i(M_{\beta\delta}M_{\gamma}^{\beta} - M_{\beta\gamma}M_{\delta}^{\beta} - M_{\alpha\delta}M_{\gamma}^{\alpha} + M_{\alpha\gamma}M_{\delta}^{\alpha}) \\
&+ M_{\gamma}^{\beta}M_{\beta\delta} - M_{\delta}^{\beta}M_{\beta\gamma} - M_{\gamma}^{\alpha}M_{\alpha\delta} + M_{\delta}^{\alpha}M_{\alpha\gamma}) \\
&= i(-M_{\beta\delta}M_{\gamma}^{\beta} + M_{\beta\gamma}M_{\delta}^{\beta} - M_{\alpha\delta}M_{\gamma}^{\alpha} + M_{\alpha\gamma}M_{\delta}^{\alpha}) \\
&- M_{\gamma}^{\beta}M_{\beta\delta} + M_{\delta}^{\beta}M_{\beta\gamma} - M_{\gamma}^{\alpha}M_{\alpha\delta} + M_{\delta}^{\alpha}M_{\alpha\gamma}) = 0. \quad \checkmark
\end{aligned}$$

Ovde smo primenili komutacionu relaciju Lorentz-ove grupe, pa smo iskoristili antisimetričnost generatora na zamenu indeksa $M_{\alpha\beta} = -M_{\beta\alpha}$ i na kraju dobili da se sabirci međusobno potiru. Pre nego što proverimo drugi komutator, definisaćemo dualni generator

$$\tilde{M}_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}M^{\gamma\delta}.$$

Pomoću ovog operatora drugi Casimir-ov operator je jednak

$$\tilde{C} = 2M^{\alpha\beta}\tilde{M}_{\alpha\beta}.$$

Pre nego što odredimo komutator $[\tilde{M}_{\alpha\beta}, M_{\gamma\delta}]$ potražimo dualni generator od dulanog generatora

$$\tilde{\tilde{M}}_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}\tilde{M}^{\gamma\delta} = \frac{1}{4}\underbrace{\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}\varepsilon^{\gamma\delta\mu\nu}}_{-2(\delta_{\alpha}^{\mu}\delta_{\beta}^{\nu} - \delta_{\alpha}^{\nu}\delta_{\beta}^{\mu})}M_{\mu\nu} = -\frac{1}{2}(M_{\alpha\beta} - M_{\beta\alpha}) = -M_{\alpha\beta},$$

što je polazni generator (do na znak). Ovde smo koristili identitet za kontrakciju dva epsilon-simbola u 1+3-dimenzije. Dakle, imamo da je $M_{\alpha\beta} = -\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}\tilde{M}^{\gamma\delta}/2$. Sad ćemo da odredimo komutator

$$\begin{aligned}
[\tilde{M}_{\alpha\beta}, M_{\gamma\delta}] &= \frac{1}{2}\varepsilon_{\alpha\beta}{}^{\mu\nu}[M_{\mu\nu}, M_{\gamma\delta}] \\
&= \frac{i}{2}\varepsilon_{\alpha\beta}{}^{\mu\nu}(\eta_{\mu\gamma}M_{\nu\delta} - \eta_{\mu\delta}M_{\nu\gamma} - \eta_{\nu\gamma}M_{\mu\delta} + \eta_{\nu\delta}M_{\mu\gamma}) \\
&= \frac{i}{2}(\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}{}^{\nu}M_{\nu\delta} - \varepsilon_{\alpha\beta\delta}{}^{\nu}M_{\nu\gamma} + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}{}^{\mu}M_{\mu\delta} - \varepsilon_{\alpha\beta\delta}{}^{\nu}M_{\mu\gamma}) \\
&= i(\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}{}^{\nu}M_{\nu\delta} - \varepsilon_{\alpha\beta\delta}{}^{\nu}M_{\nu\gamma}) \\
&= -\frac{i}{2}(\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}{}^{\nu}\varepsilon_{\nu\delta\rho\sigma}\tilde{M}^{\rho\sigma} - \varepsilon_{\alpha\beta\delta}{}^{\nu}\varepsilon_{\nu\gamma\rho\sigma}\tilde{M}^{\rho\sigma}) \\
&= -\frac{i}{2}(\eta_{\alpha\delta}\eta_{\beta\rho}\eta_{\gamma\sigma} + \eta_{\gamma\delta}\eta_{\alpha\rho}\eta_{\beta\sigma} + \eta_{\beta\delta}\eta_{\gamma\rho}\eta_{\alpha\sigma} \\
&\quad - \eta_{\alpha\delta}\eta_{\beta\sigma}\eta_{\gamma\rho} - \eta_{\gamma\delta}\eta_{\alpha\sigma}\eta_{\beta\rho} - \eta_{\beta\delta}\eta_{\gamma\sigma}\eta_{\alpha\rho} \\
&\quad - \eta_{\alpha\gamma}\eta_{\beta\rho}\eta_{\delta\sigma} - \eta_{\delta\gamma}\eta_{\alpha\rho}\eta_{\beta\sigma} - \eta_{\beta\gamma}\eta_{\rho\delta}\eta_{\alpha\sigma} \\
&\quad + \eta_{\alpha\gamma}\eta_{\beta\sigma}\eta_{\delta\rho} + \eta_{\delta\gamma}\eta_{\alpha\sigma}\eta_{\beta\rho} + \eta_{\beta\gamma}\eta_{\delta\sigma}\eta_{\alpha\rho})\tilde{M}^{\rho\sigma} \\
&= -\frac{i}{2}(\eta_{\alpha\delta}\tilde{M}_{\beta\gamma} + \eta_{\gamma\delta}\tilde{M}_{\alpha\beta} + \eta_{\beta\delta}\tilde{M}_{\gamma\alpha} - \eta_{\alpha\delta}\tilde{M}_{\gamma\beta} - \eta_{\gamma\delta}\tilde{M}_{\beta\alpha} - \eta_{\beta\delta}\tilde{M}_{\alpha\gamma} \\
&\quad - \eta_{\alpha\gamma}\tilde{M}_{\beta\delta} - \eta_{\gamma\delta}\tilde{M}_{\alpha\beta} - \eta_{\beta\gamma}\tilde{M}_{\delta\alpha} + \eta_{\alpha\gamma}\tilde{M}_{\delta\beta} + \eta_{\gamma\delta}\tilde{M}_{\beta\alpha} + \eta_{\beta\gamma}\tilde{M}_{\alpha\delta}) \\
&= i(\eta_{\alpha\gamma}\tilde{M}_{\beta\delta} - \eta_{\alpha\delta}\tilde{M}_{\beta\gamma} - \eta_{\beta\gamma}\tilde{M}_{\alpha\delta} + \eta_{\beta\delta}\tilde{M}_{\alpha\gamma}).
\end{aligned}$$

Ovaj komutator pokazuje da se $\tilde{M}_{\alpha\beta}$ pri Lorentz-ovim transformacijama menja kao tenzor ranga dva. Ovaj rezultat nam je zgodna priprema da odredimo traženi komutator:

$$[\tilde{C}, M_{\gamma\delta}] = [2M^{\alpha\beta}\tilde{M}_{\alpha\beta}, M_{\gamma\delta}]$$

$$\begin{aligned}
&= 2[M_{\alpha\beta}, M_{\gamma\delta}] \tilde{M}^{\alpha\beta} + 2M^{\alpha\beta} [\tilde{M}_{\alpha\beta}, M_{\gamma\delta}] \\
&= 2i(\eta_{\alpha\gamma} M_{\beta\delta} - \eta_{\alpha\delta} M_{\beta\gamma} - \eta_{\beta\gamma} M_{\alpha\delta} + \eta_{\beta\delta} M_{\alpha\gamma}) \tilde{M}^{\alpha\beta} \\
&\quad + 2iM^{\alpha\beta} (\eta_{\alpha\gamma} \tilde{M}_{\beta\delta} - \eta_{\alpha\delta} \tilde{M}_{\beta\gamma} - \eta_{\beta\gamma} \tilde{M}_{\alpha\delta} + \eta_{\beta\delta} \tilde{M}_{\alpha\gamma}) \\
&= 2i(M_{\beta\delta} \tilde{M}_{\gamma}^{\beta} - M_{\beta\gamma} \tilde{M}_{\delta}^{\beta} - M_{\alpha\delta} \tilde{M}_{\gamma}^{\alpha} + M_{\alpha\gamma} \tilde{M}_{\delta}^{\alpha} \\
&\quad + M_{\gamma}^{\beta} \tilde{M}_{\beta\delta} - M_{\delta}^{\beta} \tilde{M}_{\beta\gamma} - M_{\gamma}^{\alpha} \tilde{M}_{\alpha\delta} + M_{\delta}^{\alpha} \tilde{M}_{\alpha\gamma}) \\
&= 2i(-M_{\beta\delta} \tilde{M}_{\gamma}^{\beta} + M_{\beta\gamma} \tilde{M}_{\delta}^{\beta} - M_{\alpha\delta} \tilde{M}_{\gamma}^{\alpha} + M_{\alpha\gamma} \tilde{M}_{\delta}^{\alpha} \\
&\quad - M_{\gamma}^{\beta} \tilde{M}_{\beta\delta} + M_{\delta}^{\beta} \tilde{M}_{\beta\gamma} - M_{\gamma}^{\alpha} \tilde{M}_{\alpha\delta} + M_{\delta}^{\alpha} \tilde{M}_{\alpha\gamma}) = 0. \quad \checkmark
\end{aligned}$$

5.32 Kao što smo videli u **5.9** deutron je izospinski singlet, proton, He^3 i H^3 pripadaju dubletu, dok su pioni u izospinskom tripletu. Izospinski delovi njihovih talasnih funkcija su:

$$|d\rangle = |0,0\rangle, \quad |p\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \quad |\text{He}^3\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \quad |\text{H}^3\rangle = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle, \quad |\pi^0\rangle = |1,0\rangle, \quad |\pi^+\rangle = -|1,1\rangle.$$

U ovom zadatku razmatramo sudar protona i deuterona za koji postoje dva kanala raspada

$$p + d \rightarrow \pi^0 + \text{He}^3, \quad p + d \rightarrow \pi^+ + \text{H}^3.$$

Ukupan izospin protona i deuterona se lako računa i on iznosi $t = 1/2$ i $t_3 = 1/2$. Pošto se u sudarima održavaju kvantni brojevi izospina i konačna stanja imaju iste vrednosti izospina. Pioni i jezgra na desnoj strani šeme raspada imaju komplikovaniju izospinsku strukturu pa odgovarajuće multiplete treba da razložimo da bismo odredili stanje sa traženim vrednostima $t = 1/2$, $t_3 = 1/2$. Matematičkim jezikom, tenzorski proizvod reprezentacija izospina treba razložiti na ireducibilne komponente. Pošto su jezgra i pioni iz izospinskog dubleta $t = 1/2$ i tripleta $t = 1$, moguće vrednosti izospina pri razlaganju biće $3/2$ i $1/2$. Za prvi kanal raspada je

$$|\pi^0\rangle \otimes |\text{He}^3\rangle = |1,0\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

dok je za drugi

$$|\pi^+\rangle \otimes |\text{H}^3\rangle = -|1,1\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = -\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Da bismo odredili vrednosti izospina u ovim stanjima, treba da izračunamo komponente operatora izospina u datoj reprezentaciji. Odredimo T_3 i T_{\pm} :

$$\begin{aligned}
T_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_- &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & 1 & 0 \end{pmatrix}. \\
T_+ &= T_-^\dagger
\end{aligned}$$

Multiplet sa vrednošću izospina $t = 3/2$ obrazovan je vektorima

$$\begin{aligned}
|3/2, 3/2\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & |3/2, -3/2\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\
|3/2, 1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} T_- |3/2, 3/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
|3/2, -1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} T_+ |3/2, -3/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sqrt{2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Ova stanja se ne realiyuju u procesu rasejanja protona i deuteronu. Ipak, ona nam omogućavaju da odredimo multiplet $t = 1/2$. On je obrazovan od dva stanja koja su ortogonalna na prethodna i lako se vidi da su u pitanju

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ -\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Od ova dva stanja, prvo je linearna kombinacija stanja $|\pi^+\rangle \otimes |H^3\rangle$ i $|\pi^0\rangle \otimes |He^3\rangle$:

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} |\pi^+\rangle \otimes |H^3\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |\pi^0\rangle \otimes |He^3\rangle.$$

Za njega je $t = 1/2$ i $t_3 = 1/2$ i na osnovu amplituda raspada, možemo da odredimo relativnu širinu raspada u ova dva kanala tj. odnos verovatnoća

$$\frac{\sigma(p + d \rightarrow \pi^+ + \text{H}^3)}{\sigma(p + d \rightarrow \pi^0 + \text{He}^3)} = \left| \frac{\sqrt{\frac{2}{3}}}{\sqrt{\frac{1}{3}}} \right|^2 = 2. \quad (5.2)$$

Gornji rezultat se sa tačnošću od 10% dobija u eksperimentu.

5.33 Postoje četiri različita delta-bariona i oni čine izospinski kvadruplet. Delovi talasne funkcije u izospinskom prostoru delta-bariona su:

$$|\Delta^{++}\rangle = |3/2, 3/2\rangle, \quad |\Delta^+\rangle = |3/2, 1/2\rangle, \quad |\Delta^0\rangle = |3/2, -1/2\rangle, \quad |\Delta^-\rangle = |3/2, -3/2\rangle.$$

Tri piona čine triplet, s izospinskim delovima talasnih funkcija

$$|\pi^+\rangle = |1, 1\rangle, \quad |\pi^0\rangle = |1, 0\rangle, \quad |\pi^-\rangle = |1, -1\rangle.$$

Videli smo da su nukleoni izospinski dublet

$$|p\rangle = |1/2, 1/2\rangle, \quad |n\rangle = |1/2, -1/2\rangle.$$

Svi delta-barioni se dominantno raspadaju na pion i nukleon. Zbog zakona održanja naelektrisanja, Δ^{++} se raspada na π^+ i p . Zato možemo da napišemo da je

$$|\Delta^{++}\rangle = |\pi^+\rangle|p\rangle.$$

Dalje, Δ^+ barion se raspada kroz dva kanala

$$\Delta^+ \rightarrow \pi^0 + p, \quad \Delta^+ \rightarrow \pi^+ + n.$$

Da bismo našli relativne širine raspada delovaćemo s operatorom spuštanja treće komponente izospina I_- na jednačinu $|\Delta^{++}\rangle = |\pi^+\rangle|p\rangle$ (koja je ekvivalentna sa jednačinom o jedinstvenosti stanja maksimalnog izospina $|3/2, 3/2\rangle = |1, 1\rangle|1/2, 1/2\rangle$).

$$\begin{aligned} I_-|\Delta^{++}\rangle &= I_- (|\pi^+\rangle|p\rangle) \Rightarrow I_-|3/2, 3/2\rangle = I_- (|1, 1\rangle|1/2, 1/2\rangle) \\ &= (I_-|1, 1\rangle)|1/2, 1/2\rangle + |1, 1\rangle(I_-|1/2, 1/2\rangle) \\ &\Rightarrow \sqrt{3}|3/2, 1/2\rangle = \sqrt{2}|1, 0\rangle|1/2, 1/2\rangle + |1, 1\rangle|1/2, -1/2\rangle \\ &\Rightarrow |3/2, 1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 0\rangle|1/2, 1/2\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|1, 1\rangle|1/2, -1/2\rangle \\ &\Rightarrow |\Delta^+\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|\pi^0\rangle|p\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\pi^+\rangle|n\rangle, \end{aligned}$$

iz čega sledi da je relativna širina raspada

$$\frac{\Gamma(\Delta^+ \rightarrow \pi^0 + p)}{\Gamma(\Delta^+ \rightarrow \pi^+ + n)} = \left| \frac{\sqrt{\frac{2}{3}}}{\sqrt{\frac{1}{3}}} \right|^2 = 2.$$

Da bismo videli kako se raspada Δ^0 treba da razmotrimo stanje $|3/2, -1/2\rangle$, a njega dobijamo kad na $|3/2, 1/2\rangle$ delujemo operatorom I_- . Koristeći izraz za $|3/2, 1/2\rangle$ lako dobijamo

$$I_-|3/2, 1/2\rangle = 2|3/2, -1/2\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= I_- \left(\sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle |1/2, 1/2\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 1\rangle |1/2, -1/2\rangle \right) \\
&= \sqrt{\frac{2}{3}} I_- (|1, 0\rangle |1/2, 1/2\rangle) + \frac{1}{\sqrt{3}} I_- (|1, 1\rangle |1/2, -1/2\rangle) \\
&= \sqrt{\frac{2}{3}} (\sqrt{2} |1, -1\rangle |1/2, 1/2\rangle + |1, 0\rangle |1/2, -1/2\rangle) + \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{2} |1, 0\rangle |1/2, -1/2\rangle \\
&= \frac{2}{\sqrt{3}} |1, -1\rangle |1/2, 1/2\rangle + 2\sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle |1/2, -1/2\rangle,
\end{aligned}$$

ili u drugim oznakama

$$|\Delta^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |\pi^- \rangle |p\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |\pi^0 \rangle |n\rangle,$$

pa je relativna širina raspada Δ^0 bariona

$$\frac{\Gamma(\Delta^0 \rightarrow \pi^- + p)}{\Gamma(\Delta^0 \rightarrow \pi^0 + n)} = \left| \frac{\sqrt{\frac{1}{3}}}{\sqrt{\frac{2}{3}}} \right|^2 = \frac{1}{2}.$$

Za Δ^- postoji samo jedan kanal raspada

$$\Delta^- \rightarrow \pi^- + n,$$

tako da tu nemamo relativnu širinu raspada.

VARIJACIJE: KOVARIJANTNOST

6.1 Jednačina (6.25) kaže da se Galilei-jeva transformacija svodi na

$$\Psi'(x', t') = e^{-\frac{i}{\hbar}\left(mvx - \frac{mv^2}{2}t\right)} \Psi(x, t),$$

gde je

$$x' = x - vt, \quad t' = t.$$

Iz ove dve jednačine sledi da je

$$x = x' + vt', \quad t = t',$$

što zapravo opisuje činjenicu da se kretanje sistema S' u odnosu na S brzinom v vidi kao kretanje sistema S u odnosu na S' brzinom $-v$. Pomoću ovih jednačina imamo da je

$$\Psi'(x', t') = e^{-\frac{i}{\hbar}\left(mv(x' + vt') - \frac{mv^2}{2}t'\right)} \Psi(x' + vt', t') = e^{-\frac{i}{\hbar}\left(mvx' + \frac{mv^2}{2}t'\right)} \Psi(x' + vt', t'),$$

ili ako se obrišu znakovi prim sa x' i t' dobijamo (6.26).

6.2 Videli smo da je Galilei-jeva transformacija data sa

$$\Psi'(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\left(mvx + \frac{mv^2}{2}t\right)} \Psi(x + vt, t).$$

a) Ako primetimo da je

$$\Psi(x + vt, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (vt)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n} \Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (vt)^n \left(\frac{i}{\hbar}p\right)^n \Psi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}vt p} \Psi(x, t),$$

Galilei-jeva transformacija postaje

$$\Psi'(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\left(mvx + \frac{mv^2}{2}t\right)} e^{\frac{i}{\hbar}vt p} \Psi(x, t).$$

Kad iskoristimo Zassenhaus-ovu formulu

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]},$$

koja važi kad A i B komutiraju sa $[A, B]$ (videti zadatak 3.30) dobijamo

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}\left(mvx + \frac{mv^2}{2}t\right)} e^{\frac{i}{\hbar}vtp} &= e^{-\frac{i}{\hbar}\left(mvx + \frac{mv^2}{2}t - vtp\right) + \frac{1}{2}\frac{1}{\hbar^2}\left[mvx + \frac{mv^2}{2}t, vtp\right]} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\left(mvx + \frac{mv^2}{2}t - vtp\right) + \frac{1}{2}\frac{1}{\hbar^2}mv^2t[x, p]} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\left(mvx + \frac{mv^2}{2}t - vtp\right) + \frac{1}{2}\frac{i}{\hbar}mv^2t} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}(mvx - vtp)}, \end{aligned}$$

tako da su traženi koeficijenti

$$\alpha = -\frac{mv}{\hbar}, \quad \beta = \frac{vt}{\hbar}.$$

Dakle, Galileo-jeva transformacija se može prikazati preko delovanja operatora U na sledeći način

$$\Psi'(x, t) = U(v)\Psi(x, t),$$

gde je

$$U(v) = e^{\frac{i}{\hbar}(-mvx + vtp)}.$$

b) Poslednju formulu prepisujemo u traženom obliku

$$U(v) = e^{-\frac{i}{\hbar}(mx - tp)v},$$

pa je generator busta

$$B = mx - tp.$$

Traženi komutatori se lako nalaze:

$$[B, x] = [mx - tp, x] = -t[p, x] = i\hbar t,$$

$$[B, p] = [mx - tp, p] = m[x, p] = i\hbar m.$$

6.3 U Heisenberg-ovoj slici Galilei-jeve transformacije

$$U_H(v) = e^{-\frac{i}{\hbar}vB_H}$$

zadovoljavaju sledeće jednačine

$$U_H^{-1} x_H U_H = x_H - vt, \quad U_H^{-1} p_H U_H = p_H - mv.$$

pretpostavimo da je rešenje oblika $B_H(v) = \alpha x_H + \beta p_H$, gde su α i β konstante koje treba odrediti. Koristeći Baker-Campbell-Hausdorff-ovu formulu imamo da je

$$\begin{aligned} U_H^{-1} x_H U_H &= e^{\frac{i}{\hbar}v(\alpha x_H + \beta p_H)} x_H e^{-\frac{i}{\hbar}v(\alpha x_H + \beta p_H)} \\ &= x_H + \frac{i}{\hbar}v[\alpha x_H + \beta p_H, x_H] \\ &= x_H + \frac{i}{\hbar}v\beta \underbrace{[p_H, x_H]}_{-i\hbar} = x_H + \beta v, \end{aligned}$$

tako da je $\beta = -t$. Na isti način dobijamo i da je

$$U_H^{-1} p_H U_H = p_H - \alpha v,$$

pa je $\alpha = m$. Time dobijamo da je operator Galilei-jeve transformacije u Heisneberg-ovoj slici

$$U_H(v) = e^{-\frac{i}{\hbar}v(mx_H - tp_H)}.$$

Dobijeni operator busta je isti kao i u prethodnom zadatku, što je očekivan rezultat. Ovde smo samo dobili na drugačiji način. Vratimo se na Schrödinger-ovu sliku da bismo videli kako operator busta deluje na talasnu funkciju. U koordinatnoj reprezentaciji talasna funkcija je $\langle x|\Psi(t)\rangle = \Psi(x, t)$, dok je bustovana talasna funkcija $|\Psi'(t)\rangle = U(v)|\Psi(t)\rangle$ u koordinatnoj reprezentaciji

$$\langle x|U(v)|\Psi(t)\rangle = \langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}v(mx - tp)}|\Psi(t)\rangle.$$

Slično kao u prethodnom zadatku dobijamo da je

$$e^{-\frac{i}{\hbar}v(mx - tp)} = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{mv^2}{2}t} e^{-\frac{i}{\hbar}mvx} e^{\frac{i}{\hbar}vtp}.$$

Prvi eksponent je obična funkcija, dok drugi i treći imaju u sebi operatore koordinate i impulsa. Pošto koordinata deluje multiplikativno na stanje $|x\rangle$ a impuls je generator translacije, imamo da je

$$\langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}v(mx - tp)} = \langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{mv^2}{2}t} e^{-\frac{i}{\hbar}mvx} e^{\frac{i}{\hbar}vtp} = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{mv^2}{2}t} e^{-\frac{i}{\hbar}mvx} \langle x|e^{\frac{i}{\hbar}vtp} = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{mv^2}{2}t} e^{-\frac{i}{\hbar}mvx} \langle x + vt|$$

pa konačno dobijamo

$$\langle x|\Psi'(t)\rangle = \langle x|U(v)|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{mv^2}{2}t} e^{-\frac{i}{\hbar}mvx} \langle x + vt|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{mv^2}{2}t} e^{-\frac{i}{\hbar}mvx} \Psi(x + vt, t).$$

I ovaj rezultat je poznat iz prethodnog zadatka.

6.4 Komutator između komponenti kinematičkog impulsa

$$\Pi_i = p_i - \frac{e}{c} A_i$$

ćemo odrediti delovanjem na proizvoljnu funkciju f

$$\begin{aligned} [\Pi_i, \Pi_j]f &= \Pi_i\Pi_jf - \Pi_j\Pi_if \\ &= \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{e}{c}A_i\right)\left(-i\hbar\frac{\partial f}{\partial x_j} - \frac{e}{c}A_jf\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial f}{\partial x_j} - \frac{e}{c}A_jf\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{e}{c}A_if\right) \\ &= \cancel{-\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x_i\partial x_j}} + i\hbar\frac{e}{c}\frac{\partial A_j}{\partial x_i}f + \cancel{i\hbar\frac{e}{c}A_i\frac{\partial f}{\partial x_j}} + \cancel{i\hbar\frac{e}{c}A_j\frac{\partial f}{\partial x_i}} + \frac{e^2}{c^2}A_iA_jf \\ &+ \cancel{\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x_i\partial x_j}} - \cancel{i\hbar\frac{e}{c}\frac{\partial A_i}{\partial x_j}f} - \cancel{i\hbar\frac{e}{c}A_j\frac{\partial f}{\partial x_i}} - \cancel{i\hbar\frac{e}{c}A_i\frac{\partial f}{\partial x_j}} - \frac{e^2}{c^2}A_iA_jf \\ &= i\hbar\frac{e}{c}\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right)f \end{aligned}$$

što se može napisati i u obliku operatorske jednakosti

$$[\Pi_i, \Pi_j] = i\hbar\frac{e}{c}\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right),$$

ili još kompaktnije

$$[\Pi_i, \Pi_j] = i\hbar\frac{e}{c}\varepsilon_{ijk}B_k$$

jer je

$$B_k = \varepsilon_{klm} \frac{\partial A_m}{\partial x_l},$$

pa je

$$\varepsilon_{ijk} B_k = \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} \frac{\partial A_m}{\partial x_l} = (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) \frac{\partial A_m}{\partial x_l} = \frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j},$$

tako da se i kompaktnija forma svodi na dobijeni rezultat.

6.5 Gustina verovatnoće za česticu u elektromagnetnom polju je ista kao i kad polja nema

$$\rho(\vec{r}, t) = \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t).$$

Pri gejdž transformaciji talasna funkcija se množi faznim faktorom

$$\Psi(\vec{r}, t) \rightarrow \Psi'(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} e\chi(\vec{r}, t)} \Psi(\vec{r}, t),$$

gde je $\chi(\vec{r}, t)$ proizvoljna, realna funkcija. Konjugovanjem gornjeg izraza dobijamo kako izgleda gejdž transformacija od Ψ^* :

$$\Psi'^*(\vec{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} e\chi(\vec{r}, t)} \Psi^*(\vec{r}, t).$$

Na osnovu gornjih izraza, vidimo da se pri gejdž transformaciji gustina verovatnoće ne menja

$$\rho(\vec{r}, t) \rightarrow \rho'(\vec{r}, t) = \Psi'^*(\vec{r}, t) \Psi'(\vec{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} e\chi(\vec{r}, t)} \Psi^*(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} e\chi(\vec{r}, t)} \Psi(\vec{r}, t) = \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t).$$

Malo je više truda potrebno da bi se pokazalo da se ni fluks verovatnoće

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^*(\vec{r}, t) \nabla \Psi(\vec{r}, t) - (\nabla \Psi^*(\vec{r}, t)) \Psi(\vec{r}, t)) - \frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)$$

ne menja pri gejdž transformacijama. Prisetimo se da se vektorski potencijal transformiše

$$\vec{A}(\vec{r}, t) \rightarrow \vec{A}'(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}, t) - c \text{grad } \chi(\vec{r}, t)$$

i odredimo pravilo transformacije od $\nabla \Psi$

$$\nabla \Psi \rightarrow \nabla \Psi' = \nabla \left(e^{-\frac{i}{\hbar} e\chi(\vec{r}, t)} \Psi(\vec{r}, t) \right) = -\frac{i}{\hbar} e (\nabla \chi(\vec{r}, t)) e^{-\frac{i}{\hbar} e\chi(\vec{r}, t)} \Psi(\vec{r}, t) + e^{-\frac{i}{\hbar} e\chi(\vec{r}, t)} (\nabla \Psi(\vec{r}, t))$$

Ako primetimo i da se fluks verovatnoće može napisati

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^* \nabla \Psi) - \frac{e}{mc} \vec{A} \Psi^* \Psi,$$

račun se dosta pojednostavljuje. Pogledajmo šta se dobija gejdž transformacijom izraza $\Psi^* \nabla \Psi$

$$\Psi'^* \nabla \Psi' = e^{\frac{i}{\hbar} e\chi} \Psi^* e^{-\frac{i}{\hbar} e\chi} \left(-\frac{i}{\hbar} e (\nabla \chi) \Psi + \nabla \Psi \right) = -\frac{i}{\hbar} e (\nabla \chi) \Psi^* \Psi + \Psi^* \nabla \Psi,$$

pa je

$$\text{Im}(\Psi'^* \nabla \Psi') = -\frac{1}{\hbar} e (\nabla \chi) \Psi^* \Psi + \text{Im}(\Psi^* \nabla \Psi).$$

Što se tiče drugog sabirka u izrazu za \vec{j} već smo videli da je $\Psi'^* \Psi' = \Psi^* \Psi$, pa je

$$\vec{A}' \Psi'^* \Psi' = (\vec{A} - c \text{grad } \chi) \Psi^* \Psi.$$

Prema time, imamo da je

$$\begin{aligned} \vec{j}' &= \frac{\hbar}{m} \left(-\frac{1}{\hbar} e (\nabla \chi) \Psi^* \Psi + \text{Im}(\Psi^* \nabla \Psi) \right) - \frac{e}{mc} (\vec{A} - c (\nabla \chi)) \Psi^* \Psi \\ &= -\frac{e}{m} (\nabla \chi) \Psi^* \Psi + \vec{j} + \frac{e}{m} (\nabla \chi) \Psi^* \Psi = \vec{j}, \end{aligned}$$

čime je pokazano da je i \vec{j} invarijantno na gejdž transformacije.

FINALE: PRIBLIŽNE METODE

7.1 Stacionarnu Schrödinger-ovu jednačinu za harmonijski oscilator napisaćemo u bezdimenzionoj formi (2.11).

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

Da bismo u što većoj meri pratili analitičko rešenje dobijeno u drugoj glavi, korišćićemo bezdimenzionu oznaku koja je tamo uvedena u jednačini (2.15) $\lambda = 2E/(\hbar\omega) - 1$, pomoću koje se bezdimenziona jednačina može prepisati u obliku

$$\psi'' + (\lambda + 1 - \xi^2) \psi = 0.$$

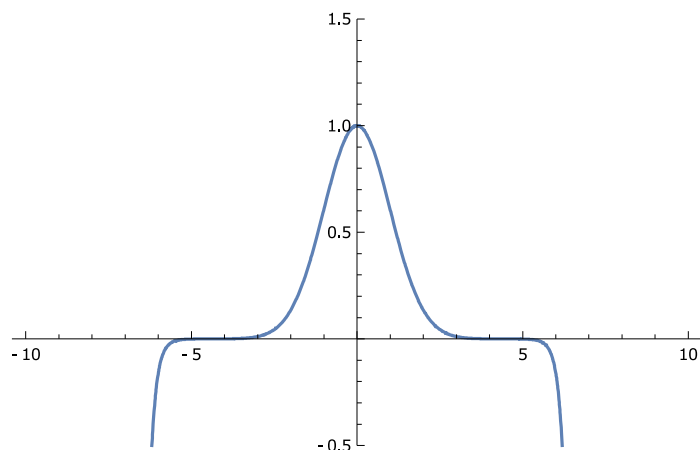
Videli smo da ova jednačina ima rešenja za $\lambda = 0, 1, 2, 3, \dots$. Pokušajmo da nađemo numeričko rešenje gornje jednačine za $\lambda = 0$. Ta pretpostavka je u ovom slučaju opravdana poznavanjem analitičkog rešenja. U programu *Mathematica*TM numeričko rešenje se može naći pomoću komande

```
Numerika1 =
NDSolve[{y''[x] + (1 - x^2) y[x] == 0,
y[0] == 1, y'[0] == 0}, y[x], {x, -10, 10}, MaxSteps -> 10000]
```

Kao što vidimo, najpre su zadati diferencijalna jednačina i početni uslovi, zatim je navedena nepoznata funkcija, interval u kome se ona traži i maksimalan broj koraka u kojima se generiše rezultat. Dobijeno rešenje možemo i nacrtati komandom

```
Plot[Evaluate[y[x] /. Numerika1], {x, -10, 10},
PlotRange -> {-0.5, 1.5}]
```

što daje



Da smo prikazali rešenje na intervalu $\{x, -5, 5\}$ ovo rešenje bi izgledalo kao analitičko i mogli bismo da kažemo da smo odredili svojstvenu energiju i svojstveno stanje. Ipak, na slici vidimo da smo dobili talasnu funkciju koja je divergentna, a to je ono što ne želimo. Ponašanje talasne funkcije za veliko x je posledica numeričkih nepreciznosti, tako da ovo ipak možemo da prihvatimo kao zadovoljavajuće rešenje. Međutim, ako pretpostavimo da je svojstvena energija malo manja, tako da je i λ neznatno veća, npr. $\lambda = 10^{-7}$ numeričko rešenje ove jednačine se dobija sa

Numerika2 =

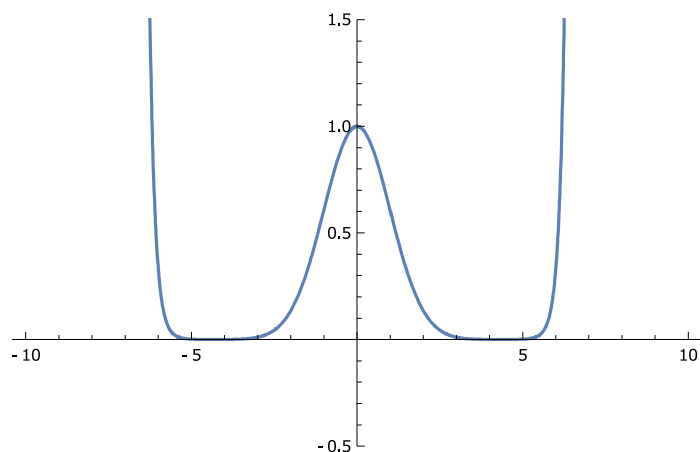
```
NDSolve[{y''[x] + (1 + 10^{-7} - x^2) y[x] == 0,
y[0] == 1, y'[0] == 0}, y[x], {x, -10, 10}, MaxSteps -> 10000]
```

Ispostavlja se da se ovo rešenje neznatno razlikuje od prvog. To vidimo kad nacrtamo drugo rešenje, slike su gotovo identične i razlika se ne vidi okom. Sad se prirodno postavlja pitanje da li je svojstvena energija $E = \hbar\omega/2$ koja odgovara vrednosti $\lambda = 0$ ili je $E = 1.0000001\hbar\omega/2$ što odgovara $\lambda = 10^{-7}$? Na osnovu analitičkog rešenja znamo da je tačan odgovor $E = \hbar\omega/2$. Ali kako to videti na osnovu numeričkog rešenja? Odgovor leži u pokušaju da nađemo numeričko rešenje za $\lambda = -10^{-7}$ što odgovara malo manjoj vrednosti od tačne.

Numerika3 =

```
NDSolve[{y''[x] + (1 - 10^{-7} - x^2) y[x] == 0,
y[0] == 1, y'[0] == 0}, y[x], {x, -10, 10}, MaxSteps -> 10000]
```

Nacrtamo li ovo rešenje dobijamo bitno različitu sliku



U intervalu $x \in (-5, 5)$ i ovo rešenje liči na analitičko ali posle toga divergira, i to na drugu stranu od prvog i drugog. Upravo ta promena znaka ukazuje da smo "prošli" pokraj svojstvene energije. Pokušajmo da razumemo zašto se to dešava. Razmotrimo harmonijski oscilator u nekom stanju. Podsetimo se kako smo dobili spektr i svojstvene energije. Tražili smo rešenja u obliku $\psi = e^{-\xi^2/2} \sum a_n \xi^n$. U rekurentnim relacijama za indekse a_n dobili smo da je rešenje divergentno ako red nije konačan polinom. Da bi E bila svojstvena energija, potrebno je da λ ima određenu vrednost za koju je neki od koeficijenata u razvoju 0. Onda su i svi ostali iza njega multi. To bismo mogli da vidimo na sledeći način:

$$\psi_\lambda(x) = e^{-x^2/2} \left(a_0 + a_1 x + \dots + a_{n-1} x^{n-1} + \underbrace{a_n}_{0} x^n + \underbrace{a_{n+1}}_{0} x^{n+1} + \dots \right)$$

Kad rešavamo jednačinu za $\lambda + \epsilon$ gde je $\epsilon \ll 1$ svi članovi članovi se od rešenja za λ razlikuju infinitezimalno, ali oni koji su bili 0, sad postaju nenulti

$$\psi_{\lambda+\epsilon}(x) = e^{-x^2/2} \left(a_0 + a_1 x + \dots + a_{n-1} x^{n-1} + \underbrace{a_n}_{\sim -\epsilon} x^n + \underbrace{a_{n+1}}_{\sim -\epsilon} x^{n+1} + \dots \right)$$

i rešenje je divergentno pri čemu je $\lim_{x \rightarrow +\infty} \psi_{\lambda+\epsilon} = -\infty$. Znak ove beskonačnosti zavisi od znaka ϵ . S druge strane, kad je parametar $\lambda - \epsilon$ i odgovarajuća talasna funkcija postaje

$$\psi_{\lambda-\epsilon}(x) = e^{-x^2/2} \left(a_0 + a_1 x + \dots + a_{n-1} x^{n-1} + \underbrace{a_n}_{\sim +\epsilon} x^n + \underbrace{a_{n+1}}_{\sim +\epsilon} x^{n+1} + \dots \right)$$

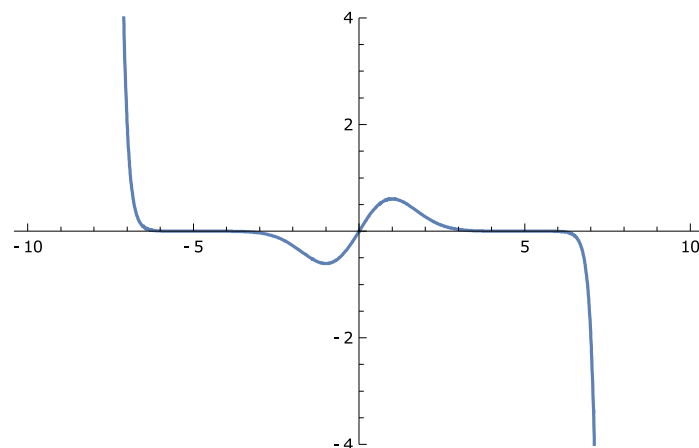
pa je $\lim_{x \rightarrow +\infty} \psi_{\lambda-\epsilon} = +\infty$. To objašnjava razliku u ponašanju numeričkog rešenja za veliko x kad se malo promeni parametar λ , odnosno kad od svojstvene energije odemo malo na jednu ili drugu stranu.

Da bismo odredili prvo pobuđeno stanje, treba menjati i granične uslove. Prvo pobuđeno stanje je neparna funkcija, pa je vrednost talasne funkcije 0 za $x = 0$. Za drugi granični uslov uzećemo da je izvod talasne funkcije u $x = 0$ jednak npr. 1. Kad ne bismo znali svojstvenu vrednost energije, dobili bismo da se promena ponašanja u $x \rightarrow +\infty$ dešava u tački $\lambda = 2$. Tako je rešenje jednačine

Numerika4 =

```
NDSolve[{y''[x] + (3 - x^2) y[x] == 0, y[0] == 0, y'[0] == 1},
  y[x], {x, -10, 10}, MaxSteps -> 10000]
```

funkcija

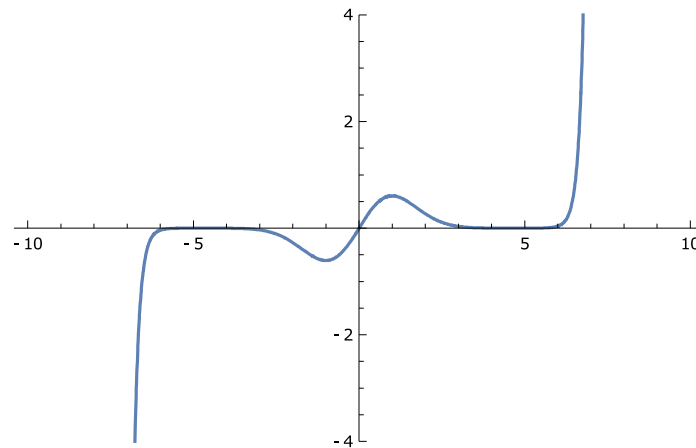


Ako malo povećamo λ dobićemo skoro isto numeričko rešenje dok se za malo manju vrednost dobija

Numerika5 =

```
NDSolve[{y''[x] + (3 - 10^{-7} - x^2) y[x] == 0, y[0] == 0,
  y'[0] == 1}, y[x], {x, -10, 10}, MaxSteps -> 10000]
```

koje izgleda ovako



To nam daje za pravo da zaključimo da će se za $\lambda = 2$ dobiti svojstvena vrednost energije i ona je jednaka $E = 3\hbar\omega/2$.

U ovom zadatku tražili smo numerička rešenja sistema koji nam je dobro poznat. Upoznali smo probleme koji se pojavljuju u ovom metodu, ali smo našli i princip koji nam omogućava da u kotinualnom skupu mogućih svojstvenih vrednosti nađemo one brojeve za koje Schrödinger-ova jednačina ima rešenje sa konačnom normom, iako dobijeno rešenje nema konačnu normu.

7.2 Neperturbisani hamiltonijan je slobodna čestica između beskonačnih zidova na rastojanju d . Taj sistem je proučen u ovom udžbeniku (videti formule (2.131) i (2.132)). Svojstvene energije i svojstvena stanja su:

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}, \quad \psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}.$$

i kao što vidimo, spektar je nedegenerisan. Perturbacija je

$$V' = \begin{cases} V_0, & x \in (l, l+d) \\ 0, & x \notin (l, l+d) \end{cases}.$$

Prva popravka energije E_n je

$$E_n^{(1)} = \langle n | V' | n \rangle = \int_l^{l+d} \frac{2}{a} V_0 \sin^2 \frac{n\pi x}{a} = V_0 \frac{d}{a} - \frac{V_0}{n\pi} \sin \frac{n\pi d}{a} \cos \frac{n\pi(2l+d)}{a},$$

dok je prva popravka n -tog svojstvenog stanja

$$\psi_n^{(1)}(x) = \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \psi_k(x), \quad c_{nk}^{(1)} = \frac{\langle n | V' | k \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}.$$

Brojilac izraza za $c_{nk}^{(1)}$ je

$$\begin{aligned}\langle n|V'|k\rangle &= \int_l^{l+d} \frac{2}{a} V_0 \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{k\pi x}{a} dx \\ &= \frac{V_0}{a} \int_l^{l+d} \cos \frac{(n-k)\pi x}{a} dx - \frac{V_0}{a} \int_l^{l+d} \cos \frac{(n+k)\pi x}{a} dx \\ &= \frac{V_0}{a} \left(\frac{a}{(n-k)\pi} \sin \frac{(n-k)\pi x}{a} \Big|_l^{l+d} - \frac{a}{(n+k)\pi} \sin \frac{(n+k)\pi x}{a} \Big|_l^{l+d} \right) \\ &= \frac{2V_0}{\pi} \left(\frac{1}{n-k} \cos \frac{(n-k)\pi(d+2l)}{2a} \sin \frac{(n-k)\pi d}{2a} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{n+k} \cos \frac{(n+k)\pi(d+2l)}{2a} \sin \frac{(n+k)\pi d}{2a} \right),\end{aligned}$$

a imenilac je

$$E_n^{(0)} - E_k^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n^2 - k^2).$$

Izraz za $c_{nk}^{(1)}$ je relativno glomazan, pa je takav i izraz za prvu korekciju n -tog stanja:

$$\begin{aligned}\psi_n^{(1)}(x) &= \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{4V_0 m a^2}{\hbar^2 \pi^3} \frac{1}{(n^2 - k^2)^2} \left((n+k) \cos \frac{(n-k)\pi(d+2l)}{2a} \sin \frac{(n-k)\pi d}{2a} \right. \\ &\quad \left. - (n-k) \cos \frac{(n+k)\pi(d+2l)}{2a} \sin \frac{(n+k)\pi d}{2a} \right) \sin \frac{k\pi x}{a}.\end{aligned}$$

7.3 Osnovni hamiltonijan

$$H_0 = \frac{p_1^2}{2m_1} - \alpha_1 \delta(x_1) + \frac{p_2^2}{2m_2} - \alpha_2 \delta(x_2)$$

je separabilan, odnosno može se videti kao zbir dva nezavisna hamiltonijana koji opisuju dve nezavisne čestice. Interakcija ove dve čestice

$$U = \lambda \delta(x_1 - x_2)$$

napravi čitav hamiltonijan neseparabilnim. To znatno otežava rešavanje svojstvenog problema hamiltonijana, pa ćemo interakciju tretirati kao perturbaciju.

Osnovni hamiltonijan opisuje dve nezavisne čestice u potencijalu delta-funkcije koja se nalazi u koordinatnom početku. Problem jedne čestice u potencijalu delta-funkcije rešen je u zadatku 2.37. Na osnovu tog rešenja nalazimo da je svojstvena funkcija neperturbisanog hamiltonijana koja odgovara osnovnom stanju

$$\psi_0^{(0)}(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{m_1 \alpha_1 m_2 \alpha_2}}{\hbar^2} e^{-\frac{1}{\hbar^2} (m_1 \alpha_1 |x_1| + m_2 \alpha_2 |x_2|)}$$

i da je energija osnovnog stanja

$$E_0^{(0)} = -\frac{m_1 \alpha_1^2 + m_2 \alpha_2^2}{2\hbar^2}.$$

Prva popravka na energiju osnovnog stanja je

$$E_0^{(1)} = \langle \psi_0 | U | \psi_0 \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \psi_0^*(x_1, x_2) \lambda \delta(x_1 - x_2) \psi_0(x_1, x_2) \\
&= \lambda \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 |\psi_0(x_1, x_1)|^2 \\
&= \lambda \frac{m_1 \alpha_1 m_2 \alpha_2}{\hbar^4} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 e^{-\frac{1}{\hbar^2} (m_1 \alpha_1 + m_2 \alpha_2) |x_1|} \\
&= 2\lambda \frac{m_1 \alpha_1 m_2 \alpha_2}{\hbar^4} \int_0^{\infty} dx_1 e^{-\frac{1}{\hbar^2} (m_1 \alpha_1 + m_2 \alpha_2) x_1} \\
&= 2\lambda \frac{m_1 \alpha_1 m_2 \alpha_2}{\hbar^2} \frac{1}{m_1 \alpha_1 + m_2 \alpha_2}
\end{aligned}$$

Prema tome, energija osnovnog stanja dve čestice u prvom redu račua perturbacije je

$$E_0 = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = -\frac{m_1 \alpha_1^2 + m_2 \alpha_2^2}{2\hbar^2} + 2\lambda \frac{m_1 \alpha_1 m_2 \alpha_2}{\hbar^2} \frac{1}{m_1 \alpha_1 + m_2 \alpha_2}$$

7.4 Ovdje ćemo uzetu da je

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \sin \frac{2\pi x}{a}, & x \in (0, a) \\ 0, & x \notin (0, a) \end{cases}$$

perturbacija. Osnovni hamiltonijan je čestica između beskonačnih zidova, pa je prva popravka energije n -tog stanja

$$\begin{aligned}
E_n^{(1)} &= \langle n|V|n \rangle = V_0 \frac{2}{a} \int_0^a \sin \frac{2\pi x}{a} \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx \\
&= \frac{2V_0}{a} \int_0^a \frac{1 - \cos \frac{2n\pi x}{a}}{2} \sin \frac{2\pi x}{a} dx \\
&= \frac{V_0}{a} \int_0^a \left(\sin \frac{2\pi x}{a} - \frac{1}{2} \sin \frac{2\pi(1+n)x}{a} - \frac{1}{2} \sin \frac{2\pi(1-n)x}{a} \right) dx = 0
\end{aligned}$$

Prva popravka je nula. Stoga treba da pogledamo sledeću popravku, a ona je jednaka

$$E_n^{(2)} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^{\infty} \frac{|\langle n|V|k \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Integral u brojiocu određujemo slično kao i u prethodnom slučaju jer je podintegralna funkcija ponovo proizvod sinusnih funkcija (ovaj put ima ih tri):

$$\begin{aligned}
\langle n|V|k \rangle &= V_0 \frac{2}{a} \int_0^a \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{2\pi x}{a} \sin \frac{k\pi x}{a} dx \\
&= \frac{V_0}{2a} \int_0^a \left(\sin \frac{(n-2+k)\pi x}{a} - \sin \frac{(n-2-k)\pi x}{a} \right) dx
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\sin \frac{(n+2+k)\pi x}{a} + \sin \frac{(n+2-k)\pi x}{a} \Big) dx \\
& = \frac{2V_0}{\pi} \left(\frac{1 - (-1)^{n-k}}{(n-k)^2 - 4} - \frac{1 - (-1)^{n+k}}{(n+k)^2 - 4} \right).
\end{aligned}$$

Primitimo da za sve prirodne brojeve n i k važi da je $(-1)^{n-k} = (-1)^{n+k}$ pa je popravka energije n -tog svojstvenog stanja

$$E_n^{(2)} = \frac{128V_0^2 ma^2}{\hbar^2 \pi^4} \sum_{k \neq n} \frac{n^2 k^2}{n^2 - k^2} \frac{(1 - (-1)^{n-k})^2}{((n-k)^2 - 4)^2 ((n+k)^2 - 4)^2}.$$

7.5 Neperturbisani hamiltonijan je dvodimenziona čestica između beskonačnih zidova (zadatak 2.43). Stanja su određena sa dva kvantna broja n_x i n_y :

$$\psi_{n_x, n_y}^{(0)}(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right), \quad E_{n_x, n_y}^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2).$$

Osnovno stanje $\psi_{1,1}$ je nedegenerisano, dok je prvo pobuđeno stanje degenerisano, jer stanja $\psi_{1,2}$ i $\psi_{2,1}$ imaju istu energiju. Prvu popravku na osnovno stanje određujemo slično kao i u prethodnim zadacima

$$\begin{aligned}
E_{1,1}^{(1)} &= \langle 1, 1 | V | 1, 1 \rangle = \int_0^a \int_0^a dx dy \psi_{1,1}^{(0)*}(x, y) V(x, y) \psi_{1,1}^{(0)}(x, y) \\
&= \int_0^a \int_0^a dx dy \frac{4}{a^2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right) \frac{\lambda \hbar^2 \pi^2}{m} \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \delta\left(y - \frac{a}{3}\right) \\
&= \frac{3\lambda \hbar^2 \pi^2}{ma^2}.
\end{aligned}$$

Dakle, energija osnovnog stanja u prvom redu računa perturbacije je

$$E_{1,1} = E_{1,1}^{(0)} + E_{1,1}^{(1)} = (1 + 3\lambda) \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}.$$

Prvo pobuđeno stanje je dvostruko degenerisano. Označimo sa $|a\rangle = |1, 2\rangle$ i $|b\rangle = |2, 1\rangle$ dva stanja koja razapinju potprostor prvog pobuđenog stanja. Da bismo odredili prvu popravku prvog pobuđenog stanja, potrebno je da odredimo matrice perturbacije u bazu $\{|a\rangle, |b\rangle\}$, a oni se svode na Integrale koji se zbog delta funkcije lako računaju:

$$\begin{aligned}
\langle a | V | a \rangle &= \langle 1, 2 | V | 1, 2 \rangle = \frac{3\lambda \hbar^2 \pi^2}{ma^2} \\
\langle a | V | b \rangle &= \langle 1, 2 | V | 2, 1 \rangle = \langle b | V | a \rangle = 0 \\
\langle b | V | b \rangle &= \langle 2, 1 | V | 2, 1 \rangle = 0
\end{aligned}$$

Prve popravka energije prvog pobuđenig stanja su svojstvene vrednosti matrice

$$\begin{pmatrix} \frac{3\lambda \hbar^2 \pi^2}{ma^2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

a to su u ovom slučaju, lako je videti, $3\lambda \hbar^2 \pi^2 / (ma^2)$ i 0. Prema tome, usled prisustva perturbacije degeneracija prvog pobuđenog nivoa se gubi i pojavljuju se dva stanja sa različitim energijama:

$$E_a = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} \left(\frac{5}{2} + 3\lambda \right), \quad E_b = \frac{5\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}.$$

7.6 Popravke energije najlakše je odrediti u bazu svojstvenih stanja energije $\{|n\rangle | n \in \mathbb{N}_0\}$. Viđemo da je sistem zadat u zadatku egzaktno rešiv, pa ćemo svojstvene energije sistema uporediti sa rezultatima koje dobijemo računajući perturbacije.

a) Prva popravka n -tog energetskeg nivoa $E_n^{(0)} = \hbar\omega(n + 1/2)$ je nula, što se lako vidi:

$$E_n^{(1)} = \langle n|V|n\rangle = \lambda \langle n|V|n\rangle = \lambda \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n|(a + a^\dagger)|n\rangle = 0.$$

Druga popravka je

$$E_n^{(2)} = \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq n}}^{\infty} \frac{|\langle n|V|k\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

U ovom slučaju imamo da je

$$\begin{aligned} \langle n|V|k\rangle &= \lambda \langle n|x|k\rangle \\ &= \lambda \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n|(a + a^\dagger)|k\rangle \\ &= \lambda \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{k} \delta_{n,k-1} + \sqrt{k+1} \delta_{n,k+1} \right). \end{aligned}$$

Brojilac u izrazu za $E_n^{(2)}$ biće različit od nule samo za $k = n \pm 1$, pa imamo da je

$$E_n^{(2)} = \lambda^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\frac{n+1}{-\hbar\omega} + \frac{n}{\hbar\omega} \right) = -\frac{\lambda^2}{2m\omega^2}.$$

Vidimo da se svi nivi pomeraju za isti iznos. Perturbovani sistem ima svojstvene energije

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\lambda^2}{2m\omega^2}.$$

b) Ukupni hamiltonijan je

$$\begin{aligned} H = H_0 + V &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \lambda x = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(x^2 + \frac{2\lambda}{m\omega^2} x \right) \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(x + \frac{\lambda}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{\lambda^2}{2m\omega^2}. \end{aligned}$$

Uvedimo novu koordinatu $\xi = x + \lambda/(m\omega^2)$ i napišimo Schrödinger-ovu jednačinu za ovaj sistem

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \xi^2 \right) \psi(\xi) = \left(E + \frac{\lambda^2}{2m\omega^2} \right) \psi(\xi).$$

Ovo je jednačina harmonijskog oscilatora mase m i frekvencije ω i ima rešenja kad je

$$E + \frac{\lambda^2}{2m\omega^2} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

tako da su energijski nivoi

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\lambda^2}{2m\omega^2},$$

što je istovetno rezultatu dobijenim u prethodnom delu zadatka.

7.7 Jednodimenzioni harmonijski oscilator ima nedegenerisan spektar, pa se prve dve popravke određuju na osnovu formula koje smo koristili u prethodnih nekoliko zadataka.

- a) Svojsvene energije neperturbisanog hamiltonijana su $E_n^{(0)} = \hbar\omega(n + 1/2)$. Prve popravke su

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle n|V|n\rangle = A\langle n|x^3|n\rangle + B\langle n|x^4|n\rangle \\ &= A\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \langle n|(a + a^\dagger)^3|n\rangle + B\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle n|(a + a^\dagger)^4|n\rangle \end{aligned}$$

Prvi sabirak je 0 jer sadrži neparan broj kreacionih i anihilacionih operatora koji stanje $|n\rangle$ prevode u različito stanje. Drugi sabirak nije nula samo za one članove koji imaju isti broj kreacionih i anihilacionih operatora, a takvih je $\binom{4}{2} = 6$, pa je

$$\begin{aligned} \langle n|(a + a^\dagger)^4|n\rangle &= \langle n|(aaa^\dagger a^\dagger + aa^\dagger aa^\dagger + a^\dagger aaa^\dagger + aa^\dagger a^\dagger a + a^\dagger aa^\dagger a + a^\dagger a^\dagger aa)|n\rangle \\ &= (n+1)(n+2) + (n+1)^2 + n(n+1) + (n+1)n + n^2 + n(n-1) \\ &= 3(2n^2 + 2n + 1) \end{aligned}$$

Ovde smo koristili (3.156) i (3.157). Dakle, prva popravka n -tog svojstvenog stanja je

$$E_n^{(1)} = 3B\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (2n^2 + 2n + 1).$$

Druga popravka se nalazi na sličan način. Najpre primetimo da će matrični elementi $\langle n|V|k\rangle$ biti različiti od nule samo za $k = n - 4, n - 3, \dots, n + 4$. Dalje uočavamo da je u svakom matričnom elementu imamo samo jedan član nenulti član (ili od x^3 ili od x^4). Izračunajmo matrične elemente koji će dati doprinos drugoj popravci

$$\begin{aligned} \langle n|V|n-4\rangle &= B\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle n|x^4|n-4\rangle = B\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle n|(a^\dagger)^4|n-4\rangle \\ &= B\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}, \\ \langle n|V|n-3\rangle &= A\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \langle n|x^3|n-3\rangle = A\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \langle n|(a^\dagger)^3|n-3\rangle \\ &= A\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \sqrt{n(n-1)(n-2)}, \\ \langle n|V|n-2\rangle &= B\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle n|x^4|n-2\rangle \\ &= B\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle n|(aa^\dagger a^\dagger a^\dagger + a^\dagger aa^\dagger a^\dagger + a^\dagger a^\dagger aa^\dagger + a^\dagger a^\dagger a^\dagger a)|n-2\rangle \\ &= B\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \left((n+1)\sqrt{n(n-1)} + n\sqrt{n(n-1)} \right. \\ &\quad \left. + (n-1)\sqrt{n(n-1)} + (n-2)\sqrt{n(n-1)} \right) \\ &= 2B\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (2n-1)\sqrt{n(n-1)}, \\ \langle n|V|n-1\rangle &= A\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \langle n|x^3|n-1\rangle \\ &= A\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \langle n|(aa^\dagger a^\dagger + a^\dagger aa^\dagger + a^\dagger a^\dagger a)|n-1\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= A \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} ((n+1)\sqrt{n} + n\sqrt{n} + (n-1)\sqrt{n}) = 3A \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} n\sqrt{n}, \\
\langle n|V|n+1\rangle &= A \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \langle n|x^3|n+1\rangle \\
&= A \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \langle n|(aaa^\dagger + aa^\dagger a + a^\dagger aa)|n+1\rangle \\
&= A \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} ((n+2)\sqrt{n} + (n+1)\sqrt{n} + n\sqrt{n}) = 3A \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} (n+1)\sqrt{n}, \\
\langle n|V|n+2\rangle &= B \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \langle n|x^4|n+2\rangle \\
&= B \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \langle n|(aaaa^\dagger + aaa^\dagger a + aa^\dagger aa + a^\dagger aaa)|n+2\rangle \\
&= B \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \left((n+3)\sqrt{(n+1)(n+2)} + (n+2)\sqrt{(n+1)(n+2)} \right. \\
&\quad \left. + (n+1)\sqrt{(n+1)(n+2)} + n\sqrt{(n+1)(n+2)} \right) \\
&= 2B \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 (2n+3)\sqrt{(n+1)(n+2)}, \\
\langle n|V|n+3\rangle &= A \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \langle n|x^3|n+3\rangle = A \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \langle n|a^3|n+3\rangle \\
&= A \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}, \\
\langle n|V|n+4\rangle &= B \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \langle n|x^4|n+4\rangle = B \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \langle n|a^4|n+4\rangle \\
&= B \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}.
\end{aligned}$$

Pomoću ovih rezultata nalazimo da je druga popravka n -tog nivoa u aproksimaciji anharmoniciteta jednaka

$$E_n^{(2)} = -A^2 \frac{\hbar^2}{8m^3\omega^4} (21n^2 + 12n + 2) - B^2 \frac{\hbar^3}{8m^4\omega^5} (30n^3 + 35n^2 + 38n + 12).$$

b) Morse-ov potencijal je određen sa dva parametra D i a :

$$U(x) = D(e^{-2ax} - 2e^{-ax}).$$

Razvojem u Taylor-ove red, zaključno sa četvrtim stepenom, dobijamo da je

$$U(x) \approx -D + Da^2x^2 - Da^3x^3 + \frac{7}{12}Da^4x^4$$

pa su traženi koeficijenti

$$\omega^2 = \frac{2Da^2}{m}, \quad C = -Da^3, \quad D = \frac{7}{12}Da^4.$$

7.8 Osnovni hamiltonijan je

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \frac{p_yx^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2y^2.$$

Spektar ovog hamiltonijana je

$$E_{n_x, n_y}^{(0)} = \hbar\omega(n_x + n_y + 1),$$

dok su svojstvena stanja $|n_x, n_y\rangle = |n_x\rangle|n_y\rangle$. Osnovno stanje $|0, 0\rangle$ je nedegenerisano, dok je prvo pobuđeno stanje dvostruko degenerisano $E_{1,0}^{(0)} = E_{0,1}^{(0)} = 2\hbar\omega$.

- a) Neka su $|a\rangle = |1, 0\rangle = |1\rangle|0\rangle$ i $|b\rangle = |0, 1\rangle = |0\rangle|1\rangle$ stanja koja odgovaraju prvom pobuđenom nivou. Matrični elementi perturbacije u prvom redu su

$$V_{aa} = \langle a|V|a\rangle = \langle 1, 0|\alpha xy|1, 0\rangle = \alpha\langle 1|x|1\rangle\langle 0|y|0\rangle = 0,$$

$$V_{ab} = \langle a|V|b\rangle = \langle 1, 0|\alpha xy|0, 1\rangle = \alpha\langle 1|x|0\rangle\langle 0|y|1\rangle = \alpha\frac{\hbar}{2m\omega},$$

$$V_{ba} = \langle a|V|b\rangle = \langle b|V|a\rangle^* = \alpha\frac{\hbar}{2m\omega},$$

$$V_{bb} = \langle b|V|b\rangle = \langle 0, 1|\alpha xy|0, 1\rangle = \alpha\langle 0|x|0\rangle\langle 1|y|1\rangle = 0.$$

U bazisu $\{|a\rangle, |b\rangle\}$ perturbacija se reprezentuje matricom

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar\alpha}{2m\omega} \\ \frac{\hbar\alpha}{2m\omega} & 0 \end{pmatrix}$$

Prve popravke na energiju su svojstvene vrednosti ove matrice i njih dobijamo iz odgovarajuće karakteristične jednačine (koja se naziva sekularna jednačina):

$$\begin{vmatrix} E^{(1)} - \frac{\hbar\alpha}{2m\omega} & \frac{\hbar\alpha}{2m\omega} \\ \frac{\hbar\alpha}{2m\omega} & E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow (E^{(1)})^2 - \left(\frac{\hbar\alpha}{2m\omega}\right)^2 = 0 \Rightarrow E_{\pm}^{(1)} = \pm \frac{\hbar\alpha}{2m\omega}.$$

Prema tome, svojstvene vrednosti ukupnog hamiltonijana su

$$E_- = 2\hbar\omega - \frac{\hbar\alpha}{2m\omega}, \quad E_+ = 2\hbar\omega + \frac{\hbar\alpha}{2m\omega}.$$

Svojstvena stanja ukupnog hamiltonijana nalazimo tako što ćemo odrediti svojstvene vektore matrice perturbacije. Naime, bilo koja linearna kombinacija vektora $|a\rangle$ i $|b\rangle$ je svojstveni vektor neperturbisanog hamiltonijana, jer je stanje degenerisano. Samo su neki vektori svojstveni od perturbacije, tako da su onda ti isti vektori svojstveni i za čitav hamiltonijan. Označimo sa $|-\rangle = a_-|a\rangle + b_-|b\rangle$ svojstveni vektor matrice perturbacije kojoj odgovara svojstvena vrednost $\lambda_- = -\hbar\alpha/(2m\omega)$. Dalje imamo

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar\alpha}{2m\omega} \\ \frac{\hbar\alpha}{2m\omega} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_- \\ b_- \end{pmatrix} &= -\frac{\hbar\alpha}{2m\omega} \begin{pmatrix} a_- \\ b_- \end{pmatrix} \Rightarrow b_- = -a_- \Rightarrow |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\rangle - |b\rangle) \\ &\Rightarrow |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0\rangle - |0, 1\rangle). \end{aligned}$$

Kad potražimo svojstveni vektor matrice perturbacije koji odgovara svojstvenoj vrednosti $\lambda_+ = \hbar\alpha/(2m\omega)$ dobićemo da je to

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\rangle + |b\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0\rangle + |0, 1\rangle).$$

Ovaj vektor je svojstven za čitav hamiltonijan, a odgovarajuća svojstvena vrednost je $E = 2\hbar\omega + \hbar\alpha/(2m\omega)$.

- b) Drugi pobuđeni nivo je trostruko degenerisan $E_{2,0}^{(0)} = E_{1,1}^{(0)} = E_{0,2}^{(0)} = 3\hbar\omega$. Vektori koja razapinju potprostor ovog nivoa su $|a\rangle = |2, 0\rangle$, $|b\rangle = |1, 1\rangle$ i $|c\rangle = |0, 2\rangle$. Prva popravka energije se dobija iz sekularne jednačine koja je u ovom slučaju

$$\begin{vmatrix} V_{aa} - E^{(1)} & V_{ab} & V_{ac} \\ V_{ba} & V_{bb} - E^{(1)} & V_{bc} \\ V_{ca} & V_{cb} & V_{cc} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0.$$

Matrični elementi u ovoj jednačini se određuju analogno kao i u prethodnom delu zadatka. Lako se vidi da je

$$\begin{aligned} V_{aa} &= V_{bb} = V_{cc} = V_{aca} = V_{ca} = 0, \\ V_{ab} &= V_{ba} = V_{bc} = V_{cb} = \sqrt{2} \frac{\hbar\alpha}{2m\omega} \end{aligned}$$

Uvedimo oznaku $A = \hbar\alpha/(m\omega)$. Tad sekularna jednačina daje

$$\begin{vmatrix} -E^{(1)} & \frac{A}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{A}{\sqrt{2}} & -E^{(1)} & \frac{A}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{A}{\sqrt{2}} & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow -(E^{(1)})^3 + E^{(1)}A^2 = 0$$

$$\Rightarrow E_1^{(1)} = -A = -\frac{\hbar\alpha}{m\omega}, \quad E_2^{(1)} = 0, \quad E_3^{(1)} = A = \frac{\hbar\alpha}{m\omega},$$

što znači da se pod delovanjem perturbacije drugi nivo cepa na tri ekvidistantna nivoa, pri čemu je jedan nivo (srednji) isti kao energija sistema bez perturbacije.

7.9 Usled postojanja slabog električnog polja, koje ćemo usmeriti duž z -ose, elektron u atomu vodonika oseća dodanu interakciju opisano potencijalnom energijom

$$V = -e\vec{r} \cdot \vec{E} = -eEz = -eEr \cos\theta.$$

Ovu interakciju ćemo smatrati perturbacijom na osnovni hamiltonijan

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}.$$

Ovaj hamiltonijan smo detaljno proučili i znamo da je osnovno stanje $\psi_1^{(0)}$ nedegerisano i da je odgovarajuća energija $E_1^{(0)} = -e^2/(2a_0)$. Prvu popravku možemo da odredimo pomoću formule (7.10) ali tu nailazimo na probleme slične onima koji se pojavljuju kad određujemo drugu popravku energije osnovnog stanja, što je prikazano u osnovnom tekstu. Zato ćemo ovde postupati malo drugačije. Napisaćemo jednačinu koju zadovoljava prva popravka osnovnog stanja $\psi_1^{(1)}$ i naći rešenje te jednačine. Iz opštih razmatranja na početku sedme glave dobijeno je da prva popravka stanja zadovoljava jednačinu (7.8). U našem konkretnom slučaju to daje

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{r} \right) \psi_1^{(1)} - eEr \cos\theta \psi_1^{(0)} = E_1^{(0)} \psi_1^{(1)} + E_1^{(1)} \psi_1^{(0)}.$$

Ovde je $\psi_1^{(0)} = \pi^{-1/2} a_0^{-3/2} \exp(-r/a_0)$ osnovno stanje neperturbisanog hamiltonijana. Jednačina se pojednostavljuje ako primetimo da je zbog integracije po θ

$$E_1^{(1)} = \langle \psi_1^{(0)} | V | \psi_1^{(0)} \rangle = -eE \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r \cos\theta e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi = 0.$$

Dakle, jednačina postaje

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right) - \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{2a_0}\right) \psi_1^{(1)} = \frac{eEr \cos \theta}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}.$$

Rešenje ove nehomogene diferencijalne jednačine tražimo u obliku

$$\psi_1^{(1)} = f(r) e^{-\frac{r}{a_0}} \cos \theta$$

gde je $f(r)$ analitička funkcija koja je jednaka 0 za $r \rightarrow 0$. Kad ubacimo pretpostavljeno rešenje, dobijamo da $f(r)$ zadovoljava jednačinu

$$f''(r) + \frac{2}{r} f'(r) - \frac{2}{a_0} f'(r) - \frac{2}{r^2} f(r) = -\frac{2}{ea_0} \frac{E \cos \theta}{\sqrt{\pi a_0^3}} r.$$

Potražimo rešenje u obliku reda koji počinje od prvog stepena (jer je $f(r=0) = 0$)

$$f(r) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n r^n.$$

Onda je

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)c_n r^{n-2} + 2 \sum_{n=2}^{\infty} n c_n r^{n-2} - \frac{2}{a_0} \sum_{n=2}^{\infty} (n-1)c_{n-1} r^{n-2} - \sum_{n=2}^{\infty} c_n r^{n-2} = -\frac{2}{ea_0} \frac{E \cos \theta}{\sqrt{\pi a_0^3}} r.$$

Ovde smo u drugoj i četvrtoj sumi izdvojili član za $n = 1$ i ispostavilo se da se oni potiru. Izjednačavajući koeficijente uz r^0 , r^1 i r^k gde je $k \geq 2$ dobijamo

$$\begin{aligned} 2c_2 - \frac{1}{a_0} c_1 &= 0, \\ -\frac{4}{a_0} c_2 + 10c_3 &= -\frac{2}{ea_0} \frac{E}{\sqrt{\pi a_0^3}}, \\ c_{n+1} &= \frac{2}{a_0} \frac{1}{n+3} c_n, \quad n \geq 3 \end{aligned}$$

Ako uzmemo da je $c_3 = 0$, onda su i svi $c_{k>3} = 0$, dok su

$$c_2 = \frac{E}{2e} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}, \quad c_1 = \frac{a_0 E}{e} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}.$$

Time smo odredili prvu korekciju osnovnog stanja, ona je

$$\psi_1^{(1)} = \frac{E}{e} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \left(a_0 r + \frac{1}{2} r^2\right) e^{-\frac{r}{a_0}} \cos \theta.$$

Prema tome, talasna funkcija sa prvom popravkom je

$$\psi_1 = \psi_1^{(0)} \left(1 + \frac{E}{e} \left(a_0 r + \frac{r^2}{2}\right) \cos \theta\right).$$

Druga popravka energije može da se odredi preko prve popravke stanja (videti jednačinu (7.17)):

$$E_1^{(2)} = \langle \psi_1^{(0)} | V | \psi_1^{(1)} \rangle = - \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \frac{E^2}{\pi a_0^3} \left(a_0 r^4 + \frac{1}{2} r^5\right) e^{-\frac{2r}{a_0}} \cos^2 \theta \sin \theta dr d\theta d\varphi = -\frac{9}{4} a_0^3 E^2.$$

7.10 Ako je potencijalna energija $U = -q^2/r$, poznato nam je rešenje Schrödinger-ove jednačine. U ovom primeru potencijal je takav samo unutar sfere poluprečnika Bohr-ovog radijusa, dok je van sfere ekraniran. Da bismo mogli da primenimo teoriju perturbacije, uzećemo da je potencijalna energija osnovnog hamiltonijana Coulomb-ova, a onda je perturbacija zapravo jednaka

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < a_0 \\ \frac{q^2}{r} (1 - e^{-\lambda(r-a_0)}), & r > a_0 \end{cases}.$$

Osnovno stanje je nedegenerisano i prva popravka energije je

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= \langle \psi_1^{(0)} | V | \psi_1^{(0)} \rangle = \int_{a_0}^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} \frac{q^2}{r} (1 - e^{-\lambda(r-a_0)}) r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi \\ &= \frac{4q^2}{a_0^3} \left(\int_{a_0}^{\infty} r e^{-\frac{2}{a_0}r} dr - e^{\lambda a_0} \int_{a_0}^{\infty} r e^{-\left(\frac{2}{a_0} + \lambda\right)r} dr \right). \end{aligned}$$

Oba integrala su istog oblika i rešavaju se parcijalnom integracijom

$$\int_{a_0}^{\infty} r e^{\alpha r} dr = \frac{1 + \alpha a_0}{\alpha^2} e^{-\alpha a_0},$$

pa je konačno

$$E_1^{(1)} = \frac{4q^2}{a_0^3} \left(\frac{1 + \frac{2}{a_0} a_0}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^2} e^{-2} + e^{\lambda a_0} \frac{1 + \left(\frac{2}{a_0} + \lambda\right) a_0}{\left(\frac{2}{a_0} + \lambda\right)^2} e^{-\left(\frac{2}{a_0} + \lambda\right) a_0} \right) = \lambda q^2 \frac{8 + 3\lambda a_0}{(2 + \lambda a_0)^2} e^{-2}.$$

7.11 Ako je naelektrisanje Ze raspoređeno unutar sfere poluprečnika b onda električno polje u prostoru nalazimo na osnovu Gauss-ove teoreme koja u CGS sistemu ima oblik

$$\oiint_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = 4\pi \iiint \rho dV,$$

i koja daje

$$\vec{E} = \begin{cases} \frac{Ze}{b^3} r \vec{e}_r, & r < b \\ \frac{Ze}{r^2} \vec{e}_r, & r > b \end{cases}$$

Ako uzmemo da je potencijal u beskonačnosti jednak 0, dobijamo da je jednak

$$\Phi = \begin{cases} \frac{Ze}{2b} \left(3 - \frac{r^2}{b^2} \right), & r < b \\ \frac{Ze}{r}, & r > b \end{cases}$$

pa je potencijalna energija loptastog naelektrisanja

$$U(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{2b} \left(3 - \frac{r^2}{b^2} \right), & r < b \\ -\frac{Ze^2}{r}, & r > b \end{cases}$$

Poredeći ovaj izraz sa potencijalnom energijom tačkastog naelektrisanja, vidimo da je perturbacija prisutna samo unutar lopte poluprečnika b i jednaka je

$$V(r) = Ze^2 \left(\frac{1}{r} - \frac{3}{2b} + \frac{r^2}{2b^3} \right).$$

Prva popravka osnovnog stanja je

$$E_1^{(1)} = \langle \psi_1^{(0)} | V | \psi_1^{(0)} \rangle = Ze^2 \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^b \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{-\frac{2r}{a_0}} \left(\frac{1}{r} - \frac{3}{2b} + \frac{r^2}{2b^3} \right) r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi$$

$$= \frac{4Ze^2}{a_0^3} \int_0^b e^{-\frac{2r}{a_0}} \left(r - \frac{3}{2b} r^2 + \frac{1}{2b^3} r^4 \right) dr$$

Da bismo sproveli integraciju po r treba da razmotrimo integrale u kojima je podintegralna funkcija proizvod eksponencijalne $e^{-\alpha r}$ i stepene funkcije r^n . Za takve integrale postoji jednostavna rekurentna veza koja se dobija parcijalnom integracijom:

$$I_{n+1} = \int_0^b e^{-\alpha r} r^{n+1} dr = -\frac{b^{n+1} e^{-\alpha b}}{\alpha} + \frac{n+1}{\alpha} I_n.$$

Pošto je

$$I_1 = \frac{1 - (1 + \alpha)e^{-\alpha b}}{\alpha^2},$$

možemo odrediti integral koji se pojavljuje u izrazu za $E_1^{(1)}$

$$E_1^{(1)} = \frac{Ze^2}{a_0} \frac{2b^3 + 3a_0(a_0^2 - b^2 - e^{-\frac{2b}{a_0}}(a_0 + b)^2)}{2b^3}.$$

Pošto je jezgro jako malo, $a_0 \gg b$, ovaj rezultat se može napisati i u jednostavnijem, a opet dovoljno tačnom obliku. Ako uvedemo malu veličinu $\xi = b/a_0$ i razvijemo gornji izraz u Taylorov red oko 0, dobićemo da je prvi nenulti član kvadratičan po ξ i da je

$$E_1^{(1)} = \frac{Ze^2}{a_0} \frac{2b^2}{5a_0^2}.$$

Do istog rezultata mogli smo da dođemo zantno jednostavnije. Uzmimo aproksimaciju $b \ll a_0$ na samom početku, tako da je $\exp(-r/a_0) = 1$ za sve $r < b$. Ovo zapažanje uprošćava integrale i dovodi do istog približnog rezultata

$$E_1^{(1)} = \frac{4Ze^2}{a_0^3} \int_0^b \left(r - \frac{3}{2b} r^2 + \frac{1}{2b^3} r^4 \right) dr = \frac{Ze^2}{a_0} \frac{2b^2}{5a_0^2}.$$

7.12 Schrödinger-ova jednačina krutog rotatora momenta inercije I je

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \frac{d^2}{d\varphi^2} \psi(\varphi) = E\psi(\varphi).$$

Talasna funkcija je periodična $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$. Uz taj uslov, rešavanjem Schrödinger-ove jednačine se nalaze svojstvene funkcije i odgovarajuće energije

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \quad m \in \mathbb{Z}.$$

Kao što vidimo, osnovno stanje $E_0 = 0$ je nedegenerisano, dok su ostale energije E_m dvostruko degenerisane (stanja koja razapinju potprostor iste energije su ψ_m i ψ_{-m}). Na kruti rotator deluje perturbacija $V = \lambda \sin(\varphi/2)$. Popravka energije osnovnog stanja je

$$E_0^{(1)} = \langle \psi_0 | V | \psi_0 \rangle = \lambda \int_0^{2\pi} \psi_0^*(\varphi) \sin \frac{\varphi}{2} \psi_0(\varphi) d\varphi = \frac{\lambda}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin \frac{\varphi}{2} d\varphi = \frac{2\lambda}{\pi}.$$

Da bismo odredili pomeranje m -tog pobuđenog nivoa E_m treba da nađemo nule pripadajuće sekularne jednačine. Matrični elementi perturbacije V su:

$$\begin{aligned}\langle \psi_m | V | \psi_m \rangle &= \lambda \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \sin \frac{\varphi}{2} \psi_m(\varphi) d\varphi = \frac{2\lambda}{\pi}, \\ \langle \psi_{-m} | V | \psi_m \rangle &= \frac{\lambda}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{2im\varphi} \frac{e^{i\frac{\varphi}{2}} - e^{-i\frac{\varphi}{2}}}{2i} d\varphi = -\frac{2\lambda}{\pi(16m^2 - 1)}, \\ \langle \psi_m | V | \psi_{-m} \rangle &= \langle \psi_{-m} | V | \psi_m \rangle^* = -\frac{2\lambda}{\pi(16m^2 - 1)}, \\ \langle \psi_{-m} | V | \psi_{-m} \rangle &= \lambda \int_0^{2\pi} \psi_{-m}^*(\varphi) \sin \frac{\varphi}{2} \psi_{-m}(\varphi) d\varphi = \frac{2\lambda}{\pi}.\end{aligned}$$

Sekularna jednačina daje

$$\begin{vmatrix} \frac{2\lambda}{\pi} - E_n^{(1)} & -\frac{2\lambda}{\pi(16m^2-1)} \\ -\frac{2\lambda}{\pi(16m^2-1)} & \frac{2\lambda}{\pi} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow E_n^{(1)} = \frac{2\lambda}{\pi} \left(1 \pm \frac{1}{16m^2-1} \right) = \frac{2\lambda}{\pi} \frac{16m^2-1 \pm 1}{16m^2-1}.$$

Dakle, ova perturbacija pomera osnovni nivo i cepa degenerisane nivoe.

7.13 Familija funkcija $\psi_a(x) = Ce^{-ax^2}$ nema nule na realnoj osi i zato može da opisuje osnovno stanje nekog jednodimenzionog sistema. Poznato nam je da je to osnovno stanje harmonijskog oscilatora, tako da očekujemo egzaktni rezultat za energiju pod **a**) i približan pod **b**).

- a)** Razmotrimo funkciju energije od varijacionog parametra a kada je hamiltonijan harmonijski oscilator

$$\begin{aligned}E_a &= \frac{\langle \psi_a | H | \psi_a \rangle}{\langle \psi_a | \psi_a \rangle} = \frac{\langle \psi_a | \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 | \psi_a \rangle}{\langle \psi_a | \psi_a \rangle} = \frac{|C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) e^{-ax^2}}{|C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2ax^2}} \\ &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2ax^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} (4a^2 x^2 - 2a) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right)}{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2ax^2}}\end{aligned}$$

U brojiocu i imeniocu imamo Poisson-ove integrale (videti jednačine (2.249), (2.250) i (2.251)) pa je

$$E_a = \frac{\sqrt{\frac{\pi}{2a^3}} \frac{4\hbar^2 a^2 + m^2 \omega^2}{8m}}{\sqrt{\frac{\pi}{2a}}} = \frac{\hbar^2 a}{2m} + \frac{m\omega^2}{8a}.$$

Da bismo našli minimum ove funkcije treba nam njen prvi izvod

$$\frac{dE_a}{da} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8a^2} = 0 \Rightarrow a = \pm \frac{m\omega}{2\hbar}.$$

Gornji integrali su izračunati pod pretpostavkom da je $a > 0$ (inače bi divergirali), tako da je jedino rešenje $a = m\omega/(2\hbar)$ pa je procenjena energija osnovnog stanja

$$E_0 = E_{a=\frac{m\omega}{2\hbar}} = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Varijacioni metod nam omogućava da u familiji funkcija na koje se ograničavamo nađemo onu koja daje najnižu energiju za dato stanje. Mi smo u ovom slučaju unutar familije funkcija imali i funkciju osnovnog stanja pa smo dobili tačan rezultat za energiju osnovnog stanja.

b) Slično kao u prethodnom slučaju imamo:

$$\begin{aligned}
 E_a &= \frac{\langle \psi_a | H | \psi_a \rangle}{\langle \psi_a | \psi_a \rangle} = \frac{\langle \psi_a | \frac{p^2}{2m} + \frac{m^2 \omega^3}{6\hbar} x^4 | \psi_a \rangle}{\langle \psi_a | \psi_a \rangle} \\
 &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2ax^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} (4a^2 x^2 - 2a) + \frac{m^2 \omega^3}{6\hbar} x^4 \right)}{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2ax^2}} \\
 &= \frac{2 \int_0^{\infty} dx e^{-2ax^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} (4a^2 x^2 - 2a) + \frac{m^2 \omega^3}{6\hbar} x^4 \right)}{2 \int_0^{\infty} dx e^{-2ax^2}} \\
 &= \frac{\frac{1}{\sqrt{2a}} \int_0^{\infty} dt e^{-t} \left(\frac{\hbar^2 a}{m} t^{-1/2} - \frac{\hbar^2 a}{m} t^{1/2} + \frac{m^2 \omega^3}{24\hbar a^2} t^{3/2} \right)}{\frac{1}{\sqrt{2a}} \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^{-1/2}} \\
 &= \frac{\frac{\hbar^2 a}{m} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2 a}{m} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) + \frac{m^2 \omega^3}{24\hbar a^2} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)} \\
 &= \frac{\hbar^2 a}{2m} + \frac{m^2 \omega^3}{32\hbar a^2}
 \end{aligned}$$

Mada je zadatak sličan kao prethodni, ovde smo radili malo drugačije. Najpre smo primetili da su integrali u brojiocu i imeniocu parni pa smo ih smenom $t = 2ax^2$ sveli na gama-funkcije. Minimum funkcije E_a se dobija za $a = m\omega/(2\hbar)$ i on iznosi

$$E = \frac{3}{8} \hbar \omega.$$

Ovim smo našli procenu energije osnovnog stanja anharmonijskog oscilatora. Pošto je prava energija osnovnog stanja manja od dobijene vrednosti, možemo zaključiti da anharmonijski oscilator ima manju energiju osnovnog stanja od harmonijskog oscilatora koji je razmotren u delu pod a).

7.14 Obe probne funkcije su neparne i u beskonačnosti imaju vrednost 0. Pošto su neparne, ortogonalne su na osnovno stanje, tako da opisuju neko stanje koje nije osnovno.

a) Odredimo kako energija zavisi od varijacionog parametra a :

$$E_a = \frac{\langle \psi_a | H | \psi_a \rangle}{\langle \psi_a | \psi_a \rangle} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-ax^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) x e^{-ax^2}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-2ax^2}}$$

U prvom sabirku brojioca zgodno je da izvršimo parcijanu integraciju i onda brojilac postaje:

$$\langle \psi_a | H | \psi_a \rangle = \frac{\hbar^2}{m} \int_0^{\infty} dx \left(\frac{d}{dx} (x e^{-ax^2}) \right)^2 + m \omega^2 \int_0^{\infty} dx x^4 e^{-2ax^2}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar^2}{m} \int_0^\infty dx e^{-2ax^2} (1 - 4ax^2 + 4a^2x^4) + m\omega^2 \int_0^\infty dx e^{-2ax^2} x^4 \\
&= \frac{1}{\sqrt{2a}} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty dt e^{-t} (t^{-1/2} - 2t^{1/2} + t^{3/2}) + \frac{m\omega^2}{2a} \int_0^\infty dt e^{-t} t^{1/2} \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2a}} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{3\sqrt{\pi}}{4} + \frac{m\omega^2}{2a} \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \right).
\end{aligned}$$

Imenilac lako nalazimo

$$\langle \psi_a | \psi_a \rangle = 2 \int_0^\infty dx x^2 e^{-2ax^2} = \frac{1}{\sqrt{2a}} \frac{1}{2a} \frac{\sqrt{\pi}}{2},$$

pa je

$$E_a = \frac{3\hbar^2}{2m} a + \frac{3m\omega^2}{8a}.$$

Ova funkcija ima minimum za $a = m\omega/(2\hbar)$ i on je jednak

$$E_{a=\frac{m\omega}{2\hbar}} = \frac{3\hbar\omega}{2}.$$

Ovo je jednako energiji prvog pobuđenog stanja harmonijskog oscilatora. Opet smo dobili tačan rezultat jer smo koristili probne funkcije među kojima je i prava funkcija stanja. Varijacioni metod nam garantuje da ćemo dobiti energiju koja nije niža od stvarne energije. U ovom zadatku smo tražili energiju prvog pobuđenog stanja, ali znamo da postoji i stanje niže energije, osnovno stanje. Kako je varijacioni metod znao da tražimo energiju prvog pobuđenog stanja? Odgovor je u načinu izbora probnih funkcija. One u ovom zadatku imaju jedan čvor, za razliku od osnovnog stanja koje nema čvorove. Ako se ograničimo na funkcije sa jednim čvorom, najniža moguća energija koju može da nam da varijacioni metod je $3\hbar\omega/2$. Dakle, i sad je skup mogućih energija je ograničen odozdo kao kod osnovnog stanja. Kad bismo tražili energiju drugog pobuđenog stanja, probne funkcije bi morale da imaju dva čvora.

b) Za zadatu familiju funkcija energija zavisi od variacionog parametra b na sledeći način:

$$E_b = \frac{\langle \psi_b | H | \psi_b \rangle}{\langle \psi_b | \psi_b \rangle}.$$

Oredimo najpre imenilac, jer je to jednostavnije

$$\text{Imenilac} = \langle \psi_b | \psi_b \rangle = K^2 \int_{-2b}^{-b} dx \left(2 + \frac{x}{b}\right)^2 + K^2 \int_{-b}^b dx \frac{x^2}{b^2} + K^2 \int_b^{2b} dx \left(2 - \frac{x}{b}\right)^2 = \frac{4}{3} K^2 b.$$

Brojilac se sastoji od dva sabirka, očekivane vrednosti kinetičke i potencijalne energije. Očekivanu vrednost kinetičke energije u stanju ψ_b možemo da odredimo na dva načina. U prvom načinu računamo

$$\langle \psi_a | T | \psi_a \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-2b}^{2b} \psi_b''(x) \psi_b(x) dx.$$

Primetimo da je

$$\psi'_b(x) = \begin{cases} 0, & x < -2b \\ -\frac{K}{b}, & -2b < x < -b \\ \frac{K}{b}, & -b < x < b \\ -\frac{K}{b}, & b < x < 2b \\ 0, & x > 2b \end{cases}$$

$$= -\frac{K}{b}\theta(x+2b) + 2\frac{K}{b}\theta(x+b) - 2\frac{K}{b}\theta(x-b) + \frac{K}{b}\theta(x-2b),$$

gde je $\theta(x-a)$ Heaviside-ova teta funkcija. Njen izvod je Dirac-ova delta funkcija ($\theta'(x-a) = \delta(x-a)$), pa je

$$\psi''_b(x) = -\frac{K}{b}\delta(x+2b) + 2\frac{K}{b}\delta(x+b) - 2\frac{K}{b}\delta(x-b) + \frac{K}{b}\delta(x-2b).$$

Sad je lako videti da je

$$\langle \psi_a | T | \psi_a \rangle = K^2 \frac{2\hbar^2}{mb}.$$

Drugi način da se izračuna očekivana vrednost kinetičke energije je da se izvrši parcijalna integracija, tako da je

$$\langle \psi_a | T | \psi_a \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-2b}^{2b} (\psi'_b(x))^2 dx = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-2b}^{2b} \frac{K^2}{b^2} dx = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{K^2}{b^2} 4b = K^2 \frac{2\hbar^2}{mb}.$$

Preostaje još da se odredi očekivana vrednost potencijalne energije, što je pravolinijski račun

$$\begin{aligned} \langle \psi_b | \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 | \psi_b \rangle &= \frac{1}{2} K^2 m \omega^2 \left(\int_{-2b}^{-b} dx x^2 \left(2 + \frac{x}{b}\right)^2 + \int_{-b}^b dx \frac{x^4}{b^2} + \int_b^{2b} dx x^2 \left(2 - \frac{x}{b}\right)^2 \right) \\ &= \frac{11}{15} K^2 m \omega^2 b^3. \end{aligned}$$

Prema tome, imamo da je

$$E_b = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{mb^2} + \frac{11}{20} m \omega^2 b^2.$$

Prvi izvod ove funkcije je

$$\frac{dE_b}{db} = -3 \frac{\hbar^2}{mb^2} + \frac{11}{10} m \omega^2 b = 0 \Rightarrow b = \sqrt[4]{\frac{30}{11}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},$$

tako da je procena energije prvog pobuđenog stanja

$$E_{b=\sqrt[4]{\frac{30}{11}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} = \sqrt{\frac{33}{10}} \hbar \omega.$$

Broj $\sqrt{3.3} = 1.8166$ je za nekih 20% veći od 1.5 pa je tolika i greška ove procene energije.

7.15 Razmotrimo najpre hamiltonijan

$$H = \frac{p^2}{2m} - \rho\delta(x).$$

i odredimo očekivanu vrednost hamiltonijana za familiju probnih funkcija $\psi_\lambda = Ne^{-\lambda|x|}$.

$$\begin{aligned} \langle \psi_\lambda | H | \psi_\lambda \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_\lambda(x) \psi_\lambda''(x) - \rho \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_\lambda(x) \delta(x) \psi_\lambda(x) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx (\psi_\lambda'(x))^2 - \rho \int_{-\infty}^{\infty} dx N^2 e^{-2\lambda|x|} \delta(x) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} 2 \int_0^{\infty} dx N^2 \lambda^2 e^{-2\lambda x} - \rho N^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \lambda N^2 - \rho N^2. \end{aligned}$$

Ovde smo u prvom integralu izvršili parcijalnu integraciju i iskoristili parnost podintegralne funkcije. Dalje određujemo

$$\langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (\psi_\lambda(x))^2 = 2 \int_0^{\infty} dx N^2 e^{-2\lambda|x|} = 2N^2 \int_0^{\infty} dx e^{-2\lambda x} = \frac{N^2}{\lambda},$$

tako da je

$$E_\lambda = \frac{\langle \psi_\lambda | H | \psi_\lambda \rangle}{\langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle} = \frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 - \rho\lambda.$$

Ova funkcija ima minimum za $\lambda = \rho m / \hbar^2$ i on iznosi

$$E_{\lambda = \frac{\rho m}{\hbar^2}} = -\frac{\rho^2 m}{2\hbar^2}.$$

Dobijeni izraz je tačna vrednost energije vezanog stanja u polju delta funkcije (videti zadatak 2.37). Sad razmatramo hamiltonijan sa dodatnom interakcijom

$$H = \frac{p^2}{2m} - \rho\delta(x) + \beta|x|.$$

Za datu familiju probnih funkcija ψ_λ očekivana vrednost energije E_λ se od prethodnog slučaja razlikuje samo za jedan član

$$\frac{\langle \psi_\lambda | (\beta|x|) | \psi_\lambda \rangle}{\langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle} = \frac{\lambda}{N^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx N^2 e^{-2\lambda|x|} \beta|x| = 2\lambda\beta \int_0^{\infty} dx e^{-2\lambda x} x = \frac{\beta}{2\lambda}.$$

Prema tome, sad treba da nađemo minimum funkcije

$$E_\lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 - \rho\lambda + \frac{\beta}{2\lambda}.$$

Uslov $E'_\lambda = 0$ daje jednačinu koja je ekvivalentna kubnoj po nepoznatoj varijabli λ

$$\frac{\hbar^2}{m} \lambda - \rho - \frac{\beta}{2\lambda^2} = 0$$

i nju ćemo rešiti perturbativno, koristeći se rešenjem prethodnog dela zadatka i činjenicom da je β mali parametar. Kada je $\beta = 0$ videli smo da je $\lambda = \rho m / \hbar^2$. Ako je β malo, onda očekujemo da će rešenje biti oblika

$$\lambda = \frac{\rho m}{\hbar^2} + K\beta.$$

gde je K konstanta koju ćemo sad odrediti. Uvrstimo ovo rešenje u jednačinu za λ i potražimo izraz koji je linearan po malom parametru β :

$$\frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{\rho m}{\hbar^2} + K\beta \right) - \rho - \frac{\beta}{2 \left(\frac{\rho m}{\hbar^2} + K\beta \right)^2} = 0 \Rightarrow K \frac{\hbar^2}{m} \beta - \frac{\hbar^4}{2\rho^2 m^2} \beta = 0 \Rightarrow K = \frac{\hbar^2}{2\rho^2 m}.$$

Odredivši K našli smo da je E_λ minimalno za

$$\lambda = \frac{\rho m}{\hbar^2} + \frac{\hbar^2}{2\rho^2 m} \beta.$$

Odgovarajuća energija do člana linearnog po β je

$$\begin{aligned} E_{\frac{\rho m}{\hbar^2} + \frac{\hbar^2}{2\rho^2 m} \beta} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\rho m}{\hbar^2} + \frac{\hbar^2}{2\rho^2 m} \beta \right)^2 - \rho \left(\frac{\rho m}{\hbar^2} + \frac{\hbar^2}{2\rho^2 m} \beta \right) + \frac{\beta}{2} \left(\frac{\rho m}{\hbar^2} + \frac{\hbar^2}{2\rho^2 m} \beta \right)^{-1} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\rho^2 m^2}{\hbar^4} + \frac{\rho m}{\hbar^2} \frac{\hbar^2}{\rho^2 m} \beta \right) - \frac{\rho^2 m}{\hbar^2} - \frac{\hbar^2}{2\rho m} \beta + \frac{\beta}{2} \frac{\hbar^2}{\rho m} + o(\beta^2) \\ &= -\frac{\rho^2 m}{2\hbar^2} + \frac{\hbar^2}{2\rho m} \beta + o(\beta^2). \end{aligned}$$

Ovaj rezultat nam ukazuje da dodatna interakcija pomera energiju osnovnog stanja ka većim vrednostima.

7.16 Očekivana vrednost energije je funkcija varijacionog parametra β

$$E_\beta = \frac{\langle \psi_\beta | H | \psi_\beta \rangle}{\langle \psi_\beta | \psi_\beta \rangle}.$$

Hamiltonijan koji opisuje kretanje elektrona je

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r}.$$

Pošto su probne talasne funkcije zadate u sfernim koordinatama, onda ćemo i laplasijan napisati u sfernim koordinatama. Pošto probna talasna funkcija ne zavisi od uglova, nenulti doprinos će dati samo radijalni deo laplasijana. Stoga je brojilac u izrazu za E_β jednak

$$\begin{aligned} \langle \psi_\beta | H | \psi_\beta \rangle &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin\theta C^2 e^{-\beta r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) - \frac{e^2}{r} \right) e^{-\beta r} dr d\theta d\varphi \\ &= 4\pi C^2 \int_0^\infty dr \left(-\frac{\hbar^2}{2m} (\beta^2 r^2 - 2\beta r) - r e^2 \right) e^{-2\beta r} \\ &= 4\pi C^2 \int_0^\infty \frac{dt}{2\beta} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{t^2}{4} - t \right) - e^2 \frac{t}{2\beta} \right) e^{-t} \\ &= \frac{2\pi C^2}{\beta} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{4} \Gamma(3) - \Gamma(2) \right) - \frac{e^2}{2\beta} \Gamma(2) \right) \end{aligned}$$

$$= \frac{2\pi C^2}{\beta} \left(\frac{\hbar^2}{4m} - \frac{e^2}{2\beta} \right).$$

Ovde je najpre izvršena integracija po uglovima i izračunato je delovanje laplasijana, zatim je uvedena smena $2\beta r = t$ čime su se integrali sveli na gama funkcije. Imenilac od E_β je

$$\langle \psi_\beta | \psi_\beta \rangle = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin\theta C^2 e^{-2\beta r} dr d\theta d\varphi = 4\pi C^2 \frac{1}{8\beta^3} \int_0^\infty t^2 e^{-t} dt = \pi C^2 \frac{1}{2\beta^3} \Gamma(3) = \pi C^2 \frac{1}{\beta^3},$$

pa konačno imamo da je

$$E_\beta = \frac{\hbar^2}{2m} \beta^2 - e^2 \beta.$$

Minimalna vrednost ove funkcije se dobija za β koje je rešenje jednačine

$$\frac{dE_\beta}{d\beta} = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{m} \beta - e^2 = 0 \Rightarrow \beta = \frac{e^2 m}{\hbar^2}.$$

Ta minimalna vrednost iznosi

$$E_{\beta = \frac{e^2 m}{\hbar^2}} = -\frac{e^4 m}{2\hbar^2}$$

a to je dobro poznata energija osnovnog stanja elektrona u atomu vodonika.

7.17 U ovom zadatku koristimo familiju koja dovode do tačnog rezultata za potencijal delta funkcije kod harmonijskog oscilatora i obrnuto. Želimo da vidimo koji rezultat će biti tačniji.

a) Zavisnost energije od varijacionog parametra λ računamo na standardan način

$$E_\lambda = \frac{\langle \psi_\lambda | H | \psi_\lambda \rangle}{\langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle} = \frac{\langle \psi_\lambda | \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) | \psi_\lambda \rangle}{\langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle}.$$

Familiju funkcija $\psi_\lambda(x) = e^{-\lambda|x|}$ imali smo u zadatku **7.15** ali za drugačiju potencijalnu energiju. Ipak, očekivane vrednosti kinetičke energije u brojiocu i imenilac su isti, pa ćemo te rezultate iskoristiti. Preostaje samo još da se nađe

$$\langle \psi_\lambda | \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 | \psi_\lambda \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx N^2 e^{-2\lambda|x|} x^2 = m\omega^2 N^2 \int_0^{\infty} dx e^{-2\lambda x} x^2 = \frac{m\omega^2 N^2}{4\lambda^3}.$$

Dakle, imamo da je

$$E_\lambda = \frac{\frac{\hbar^2}{2m} \lambda N^2 + \frac{m\omega^2 N^2}{4\lambda^3}}{\frac{N^2}{\lambda}} = \frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 + \frac{m\omega^2}{4\lambda^2}.$$

Minimum ove funkcije se dobija za $\lambda = (m\omega/(\sqrt{2}\hbar))^{1/2}$ i jednak je

$$E_{\lambda = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\sqrt{2}}}} = \frac{\hbar\omega}{2} \sqrt{2}.$$

Poredeći ovaj rezultat sa tačnim dobijamo da je veći od njega $\sqrt{2}$ puta.

b) Ovog puta probne funkcije su iste kao u zadatku **7.13**. Iskoristićemo delove koje smo tamo izračunali da bismo odredili

$$E_a = \frac{\langle \psi_a | H | \psi_a \rangle}{\langle \psi_a | \psi_a \rangle} = \frac{\langle \psi_a | \left(\frac{p^2}{2m} - \delta(x) \right) | \psi_a \rangle}{\langle \psi_a | \psi_a \rangle} = \frac{\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{a\pi}{2}} - \delta}{\sqrt{\frac{\pi}{2a}}} = \frac{\hbar^2}{2m} a - \rho \sqrt{\frac{2a}{\pi}}.$$

Minimum ove funkcije je

$$E_{a=\frac{2m^2\rho^2}{\pi\hbar^4}} = -\frac{m\rho^2}{\pi\hbar} = -\frac{m\rho^2}{2\hbar} \frac{2}{\pi}.$$

Pošto je $2/\pi = 0.64$ varijacioni metod daje manju grešku u ovom slučaju nego što je to u primeru razmotrenom u delu zadatka pod **a**).

7.18 Probne talasne funkcije

$$\psi_\zeta(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\zeta^3}{\pi a_0^3} e^{-\frac{\zeta}{a_0}(r_1+r_2)},$$

su normirane, pa je očekivana vrednost hamiltonijana H koji opisuje kretanje elektrona u stanju ψ_ζ jednaka

$$\begin{aligned} E_\zeta &= \langle \psi_\zeta | H | \zeta \rangle = \langle \psi_\zeta | \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | \zeta \rangle \\ &= \langle \psi_\zeta | T_1 + T_2 | \psi_\zeta \rangle + \langle \psi_\zeta | V_1 + V_2 | \psi_\zeta \rangle + \langle \psi_\zeta | V_{12} | \psi_\zeta \rangle. \end{aligned}$$

Najpre ćemo da odredimo očekivanu vrednost ukupne kinetičke energije:

$$\begin{aligned} \langle \psi_\zeta | T_1 + T_2 | \psi_\zeta \rangle &= \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 (4\pi)^2 r_1^2 r_2^2 \psi_\zeta \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial r_1} \left(r_1^2 \frac{\partial}{\partial r_1} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r_2^2} \frac{\partial}{\partial r_2} \left(r_2^2 \frac{\partial}{\partial r_2} \right) \right) \psi_\zeta \\ &= \frac{16\hbar^2 \zeta^7}{m a_0^7} \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 e^{-2\frac{\zeta}{a_0}(r_1+r_2)} \left(r_1 r_2^2 + r_1^2 r_2 - \frac{\zeta}{a_0} r_1^2 r_2^2 \right) \\ &= \frac{16\hbar^2 \zeta^7}{m a_0^7} \int_0^\infty dr_1 \frac{a_0^3}{4\zeta^3} r_1 e^{-2\frac{\zeta}{a_0} r_1} = \frac{4\hbar^2 \zeta^4}{m a_0^4} \int_0^\infty dr_1 r_1 e^{-2\frac{\zeta}{a_0} r_1} \\ &= \frac{4\hbar^2 \zeta^4}{m a_0^4} \frac{a_0^2}{4\zeta^2} = \frac{\hbar^2 \zeta^2}{m a_0^2}. \end{aligned}$$

Ovde je najpre uzeto u obzir da probna talasna funkcija ne zavisi od uglova, a potom su izvršene integracije po r_2 i r_1 . Očekivanu vrednost dela potencijalne energije koja opisuje interakciju elektrona sa jezgrom računamo na sličan način:

$$\begin{aligned} \langle \psi_\zeta | V_1 + V_2 | \psi_\zeta \rangle &= \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 (4\pi)^2 r_1^2 r_2^2 \psi_\zeta \left(-\frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} \right) \psi_\zeta \\ &= -\frac{32e^2 \zeta^6}{a_0^6} \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 e^{-2\frac{\zeta}{a_0}(r_1+r_2)} (r_1 r_2^2 + r_1^2 r_2) \\ &= -\frac{32e^2 \zeta^6}{a_0^6} \int_0^\infty dr_1 \frac{a_0^2}{4\zeta^3} (r_1 a_1 + r_1^2 \zeta) e^{-2\frac{\zeta}{a_0} r_1} = -\frac{8e^2 \zeta^3}{a_0^4} \int_0^\infty dr_1 (r_1 a_1 + r_1^2 \zeta) e^{-2\frac{\zeta}{a_0} r_1} \\ &= -\frac{8e^2 \zeta^3}{a_0^4} \frac{a_0^3}{2\zeta^2} = -\frac{4e^2 \zeta}{a_0}. \end{aligned}$$

Preostalo je još da se odredi očekivana vrednost od V_{12} , koja se računa malo drugačije u odnosu na prethodne. Ovde će se pojaviti i ugaona zavisnost.

$$\langle \psi_\zeta | V_{12} | \psi_\zeta \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}_1 \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}_2 \psi_\zeta \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi_\zeta$$

$$= \frac{e^2 \zeta^6}{\pi^2 a_0^6} \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}_1 \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}_2 e^{-2\frac{\zeta}{a_0}(r_1+r_2)} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}.$$

Najpre čemo da integralimo po \vec{r}_2 pri čemu je \vec{r}_1 konstanta. Koordinatni sistem biramo tako da je \vec{r}_1 usmereno duž z -ose. Tada je

$$\frac{1}{|r_1 \vec{e}_z - \vec{r}_2|} = \begin{cases} \frac{1}{r_2} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l P_l(\cos\theta_2), & r_1 < r_2 \\ \frac{1}{r_1} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l P_l(\cos\theta_2), & r_1 > r_2 \end{cases}.$$

Ovde je P_l Legendre-ov polinom, a θ_2 je ugao između vektora $\vec{r}_1 = r_1 \vec{e}_z$ i \vec{r}_2 . Stoga imamo da je integral po \vec{r}_2 jednak

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}_2 e^{-2\frac{\zeta}{a_0}(r_1+r_2)} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \\ &= \int_0^{\infty} dr_2 r_2^2 \int_0^{\pi} d\theta_2 \sin\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 e^{-2\frac{\zeta}{a_0}(r_1+r_2)} \begin{cases} \frac{1}{r_2} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l P_l(\cos\theta_2), & r_1 < r_2 \\ \frac{1}{r_1} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l P_l(\cos\theta_2), & r_1 > r_2 \end{cases} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dr_2 r_2^2 e^{-2\frac{\zeta}{a_0}(r_1+r_2)} \begin{cases} \frac{1}{r_2} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l, & r_1 < r_2 \\ \frac{1}{r_1} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l, & r_1 > r_2 \end{cases} \int_0^{\pi} d\theta_2 P_l(\cos\theta_2) \sin\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \end{aligned}$$

Integracija po φ_2 je trivijalna i dalje 2π . U integralu po θ_2 izvršimo smenu $\cos\theta_2 = x$, čime on postaje

$$\int_0^{\pi} d\theta_2 P_l(\cos\theta_2) \sin\theta_2 = \int_{-1}^1 P_l(x) dx = \int_{-1}^1 P_l(x) P_0(x) dx = 2\delta_{l0}.$$

Ovde smo se prisetili da je $P_0(x) = 1$ i da su Legendre-ovi polinomi ortonormirani (4.33). Ovo sad značajno pojednostavljuje integral I_2 koji je

$$\begin{aligned} I_2 &= \sum_{l=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dr_2 e^{-2\frac{\zeta}{a_0}(r_1+r_2)} r_2^2 \begin{cases} \frac{1}{r_2} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l, & r_1 < r_2 \\ \frac{1}{r_1} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l, & r_1 > r_2 \end{cases} 4\pi\delta_{l0} \\ &= 4\pi \int_0^{\infty} dr_2 e^{-2\frac{\zeta}{a_0}(r_1+r_2)} r_2^2 \begin{cases} \frac{1}{r_2}, & r_1 < r_2 \\ \frac{1}{r_1}, & r_1 > r_2 \end{cases}. \end{aligned}$$

Tražena očekivana vrednost je

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\zeta} | V_{12} | \psi_{\zeta} \rangle &= \frac{e^2 \zeta^6}{\pi^2 a_0^6} \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}_1 I_2 \\ &= \frac{4e^2 \zeta^6}{\pi a_0^6} \int_0^{\infty} dr_1 r_1^2 4\pi \int_0^{\infty} dr_2 e^{-2\frac{\zeta}{a_0}(r_1+r_2)} r_2^2 \begin{cases} \frac{1}{r_2}, & r_1 < r_2 \\ \frac{1}{r_1}, & r_1 > r_2 \end{cases} \end{aligned}$$

Integral po r_2 podelimo na dva intervala: od 0 do r_1 i od r_1 do ∞ . U prvom je $r_2 < r_1$, dok je u drugom $r_2 > r_1$. Zato gornji izraz postaje

$$\langle \psi_{\zeta} | V_{12} | \psi_{\zeta} \rangle = \frac{16e^2 \zeta^6}{a_0^6} \int_0^{\infty} dr_1 r_1^2 e^{-2\frac{\zeta}{a_0}r_1} \left(\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} dr_2 e^{-2\frac{\zeta}{a_0}r_2} r_2^2 + \int_{r_1}^{\infty} dr_2 e^{-2\frac{\zeta}{a_0}r_2} r_2 \right)$$

Prvi integral u velikoj zagradi izračunavamo tako što dva puta parcijalno integralimo, dok je za drugi dovoljno da to uradimo jednom čime dobijamo

$$\begin{aligned}\langle \psi_\zeta | V_{12} | \psi_\zeta \rangle &= \frac{16e^2\zeta^6}{a_0^6} \int_0^\infty dr_1 r_1^2 e^{-2\frac{\zeta}{a_0}r_1} \left(\frac{a_0}{r_1} \left(\frac{a_0^2}{4\zeta^3} - e^{-2\frac{\zeta}{a_0}r_1} \frac{a_0^2 + 2a_0\zeta r_1 + 2\zeta^2 r_1^2}{4\zeta^3} \right) \right. \\ &\quad \left. + e^{-2\frac{\zeta}{a_0}r_1} \frac{a_0(a_0 + 2\zeta r_1)}{4\zeta^2} \right) \\ &= \frac{16e^2\zeta^6}{a_0^5} \int_0^\infty dr_1 \frac{1}{4\zeta^3} \left(a_0^2 r_1 e^{-2\frac{\zeta}{a_0}r_1} - (a_0^2 r_1 + a_0\zeta r_1^2) e^{-4\frac{\zeta}{a_0}r_1} \right) \\ &= \frac{16e^2\zeta^6}{a_0^5} \frac{1}{4\zeta^3} \frac{5a_0^4}{32\zeta^2} = \frac{5e^2\zeta}{8a_0}\end{aligned}$$

Integrali se ovde rešavaju smenama: svode se na gama-funkcije čiji su argumenti prirodni brojevi. Ako sumiramo sve rezultate dobijamo

$$E_\zeta = \frac{\hbar^2}{ma_0^2}\zeta^2 - \frac{4e^2}{a_0}\zeta + \frac{5e^2}{8a_0}\zeta = \frac{\hbar^2}{ma_0^2}\zeta^2 - \frac{27e^2}{8a_0}\zeta.$$

Ova funkcija ima minimalnu vrednost za $\zeta = 27ma_0/(16\hbar^2)$ jednaku:

$$E_{\zeta=\frac{27ma_0}{16\hbar^2}} = -\frac{27^2}{16^2} \frac{me^4}{\hbar^2} = -\frac{27^2}{16^2} \frac{e^2}{a_0}.$$

Pošto je $E_1^H = -e^2/(2a_0) = -13.6\text{ eV}$, za energiju osnovnog stanja elektrona u atomu helijuma se dobija

$$E_1^{\text{He}} = -77.5\text{ eV},$$

a to se dosta dobro slaže sa izmerenih -78.9 eV . Do sličnog rezultata se može doći ako ovaj problem rešavamo računom teorije perturbacije. Osnovni hamiltonijan su dva nezavisna atoma vodonika u polju jezgra naelektrisanja $2e$. Osnovno stanje je nedegenerisano, odgovarajuća energija je $E_1 = -4e^2/a_0$ dok je talasna funkcija

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | 100, 100 \rangle = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2}{a_0} \right)^3 e^{-2\frac{r_1+r_2}{a_0}}.$$

Interakciju dva elektrona V_{12} uzimamo kao perturbaciju i računamo prvu popravku energije, što se svodi na integral koji smo odredili u ovom zadatku, te dobijamo isti rezultat.

7.19 Potencijalna energija naelektrisane čestice koja se nalazi u električnom polju koje ne zavisi od koordinate je $U = -q\vec{E} \cdot \vec{r}$, gde su q naelektrisanje čestice i \vec{E} vektor električnog polja. Ako koordinatni sistem fiksiramo tako da je polje usmereno duž z -ose, potencijalna energija elektrona je

$$V(t) = ezE_0 e^{-t/\tau}.$$

Ovaj član tretiramo kao perturbaciju. Osnovni hamiltonijan opisuje elektron u atomu vodonika i svojstvena stanja i energije su nam dobro poznate. Da bismo našli verovatnoću da elektron za vreme t pređe iz osnovnog stanja u prvo pobuđeno, najpre ćemo odrediti amplitude prelaza $c_{|100\rangle \rightarrow |21m\rangle}(t)$ iz stanja $|100\rangle$ u jedno od stanja $|21m\rangle$, čija je norma tražena verovatnoća (videti formulu (7.84))

$$\text{ver}(E_1 \rightarrow E_2, t) = \left| \sum_{m=-1}^1 c_{|100\rangle \rightarrow |21m\rangle}(t) \right|^2.$$

Amplitude verovatnoće su

$$c_{|100\rangle \rightarrow |21m\rangle} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{21m,100}t'} V_{21m,100}(t') dt'.$$

Ovde je

$$\omega_{21m,100} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \left(\frac{1}{4}E_1 - E_1\right) \frac{1}{\hbar} = -\frac{3E_1}{4\hbar} = \frac{3e^2}{8\hbar a_0^2} = \omega.$$

Matrični element perturbacije je

$$\begin{aligned} V_{21m,100} &= \langle 21m | er \cos\theta E_0 e^{-\frac{r}{a_0}} | 100 \rangle \\ &= eE_0 e^{-\frac{r}{a_0}} \langle 21m | r \cos\theta | 100 \rangle \\ &= eE_0 e^{-\frac{r}{a_0}} \int_0^\infty r^3 \theta R_{10}(r) R_{21}(r) dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin\theta \cos\theta Y_1^m(\theta, \varphi) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ &= eE_0 e^{-\frac{r}{a_0}} \int_0^\infty r^3 \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{1}{\sqrt{24}} \frac{1}{a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} dr \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cos\theta (2\pi \delta_{0m}) \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \cos\theta \\ &= eE_0 e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{1}{a_0^4} \frac{1}{3\sqrt{2}} \delta_{0m} \int_0^\infty e^4 e^{-\frac{3r}{2a_0}} dr \\ &= eE_0 e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{1}{a_0^4} \frac{1}{3\sqrt{2}} \delta_{0m} \frac{2^5}{3^5} a_0^5 4! \\ &= eE_0 e^{-\frac{r}{a_0}} a_0 \frac{2^8}{3^5 \sqrt{2}} \delta_{0m} \end{aligned}$$

Koraci sprovedeni ovde su očigledni, najpre je integraljeno po uglu φ , potom po θ i na kraju po r . Na osnovu dobijenog rezultata vidimo da je za $m \neq 0$ matrični element jednak 0. Jedina mogućnost da matrični element bude nenulti je za $m = 0$, tako da elektron koji iz osnovnog stanja prelazi u prvo pobuđeno ide u stanje $|210\rangle$ i verovatnoća da se to desi u vremenu t je

$$\begin{aligned} \text{ver}(E_1 \rightarrow E_2, t) &= |c_{|100\rangle \rightarrow |210\rangle}|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{2^{15}}{3^{10}} e^2 E_0^2 a_0^2 \left| \int_0^t dt' e^{(i\omega - \frac{1}{\tau})t'} \right|^2 \\ &= \frac{2^{15}}{3^{10}} \frac{e^2 E_0^2 a_0^2}{\hbar^2} \left| \frac{e^{i\omega t - \frac{t}{\tau}} - 1}{i\omega - \frac{1}{\tau}} \right|^2 \\ &= \frac{2^{15}}{3^{10}} \frac{e^2 E_0^2 a_0^2}{\hbar^2} \frac{e^{-\frac{2t}{\tau}} - 2e^{-\frac{t}{\tau}} \cos\omega t + 1}{\omega^2 + \frac{1}{\tau^2}}. \end{aligned}$$

Za jako velike je $t \gg \tau$ pa gornja verovatnoća postaje

$$\text{ver}(E_1 \rightarrow E_2, t) = \frac{2^{15}}{3^{10}} \frac{e^2 E_0^2 a_0^2}{\hbar^2} \frac{\tau^2}{\tau^2 \omega^2 + 1}.$$

7.20 U trenutku $t = -\infty$ čestica je osnovnom stanju. Svojstvena stanja čestice između zidova koji su u $-a$ i a našli smo u zadatku 2.35. Osnovno stanje je

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{2a} + \frac{\pi}{2}\right).$$

Verovatnoća da se čestica u trenutku $t = \infty$ nalazi u n -tom svojstvenom stanju

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a} + \frac{n\pi}{2}\right)$$

nalazimo na osnovu formule

$$\text{ver}(E_1 \rightarrow E_n) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{n1}t} V_{n1}(t) \right|^2.$$

Ovde su

$$\omega_{n1} = \frac{E_n - E_1}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{1}{n^2} E_1 - E_1 \right) = \frac{\hbar\pi^2}{8ma^2} (n^2 - 1),$$

dok je

$$\begin{aligned} V_{n1}(t) &= \langle n | V(x, t) | 1 \rangle \\ &= \langle n | -\frac{Cx}{1 + \frac{t^2}{\tau^2}} | 1 \rangle \\ &= -\frac{C}{1 + \frac{t^2}{\tau^2}} \int_{-a}^a dx \frac{1}{a} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a} + \frac{n\pi}{2}\right) x \sin\left(\frac{\pi x}{2a} + \frac{\pi}{2}\right) \\ &= -\frac{C}{1 + \frac{t^2}{\tau^2}} \frac{1}{a} \int_{-a}^a dx x \cos\left(\frac{n\pi}{2a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{2a} + \frac{n\pi}{2}\right) \\ &= -\frac{C}{1 + \frac{t^2}{\tau^2}} \frac{1}{a} \int_{-a}^a dx \frac{x}{2} \left(\sin\left(\frac{n\pi x}{2a} + \frac{n\pi}{2} + \frac{n\pi}{2a}\right) - \sin\left(\frac{n\pi x}{2a} + \frac{n\pi}{2} - \frac{n\pi}{2a}\right) \right) \\ &= \frac{C}{1 + \frac{t^2}{\tau^2}} \frac{8na(1 + (-1)^n)}{\pi^2(n^2 - 1)^2}. \end{aligned}$$

Integral koji se pojavljuje u izrazu za verovatnoću

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{n1}t} V_{n1}(t) = \frac{8Cna(1 + (-1)^n)}{\pi^2(n^2 - 1)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{i\omega_{n1}t}}{1 + \frac{t^2}{\tau^2}}$$

određujemo koristeći Jordan-ovu lemu. Konturu integracije zatvaramo polukružnicom poluprečnika $R \rightarrow \infty$ koja se nalazi u poluravni $\text{Im } t > 0$. Podintegralna funkcija ima jedan izolovan singularitet u $t = i\tau$, pa je

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{n1}t} V_{n1}(t) = \frac{8Cna(1 + (-1)^n)}{\pi^2(n^2 - 1)^2} (2\pi i) \text{Res}_{t=i\tau} \frac{e^{i\omega_{n1}t}}{1 + \frac{t^2}{\tau^2}} = \frac{16Cna(1 + (-1)^n)}{\pi(n^2 - 1)^2} \frac{e^{-\omega_{n1}\tau}}{\tau},$$

pa je tražena verovatnoća jednaka

$$\text{ver}(E_1 \rightarrow E_n) = \frac{256C^2 n^2 a^2 (1 + (-1)^n)^2}{\pi^2 \hbar^2 (n^2 - 1)^4 \tau^2} e^{-2\omega_{n1}\tau}.$$

Ako je n neparno, ovaj izraz je 0. To znači da čestica pod delovanjem perturbacije $V(x, t)$ iz osnovnog stanja može da pređe samo u neko od stanja čija je talasna funkcija parna.

7.21 Potencijalna energija čestice je

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - qE_0 x e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}.$$

Prva dva sabirka su osnovni hamiltonijan, dok poslednji član tretiramo kao perturbaciju $V(t)$. U $t = -\infty$ čestica se nalazi u k -tom svojstvenom stanju. Verovatnoća se se u trenutku $t = \infty$ nađe u n -tom svojstvenom stanju je

$$\text{ver}(E_k \rightarrow E_n) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_{nk}t} V_{nk}(t) dt \right|^2.$$

Slično kao u prethodna dva zadatka, nalazimo da je

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar} = \omega(n - k).$$

Koristeći bazis svojstvenih stanja energije harmonijskog oscilatora dobijamo

$$\begin{aligned} V_{nk} &= qE_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \langle n|x|k \rangle = qE_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n|(a + a^\dagger)|k \rangle \\ &= qE_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{k-1}\delta_{n,k-1} + \sqrt{k+1}\delta_{n,k+1}). \end{aligned}$$

Dakle, sistem može da pređe u stanje $k-1$ ili $k+1$ i odgovarajući matricni elementi su

$$V_{(k\pm 1)k} = qE_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{k\pm 1}.$$

Odgovarajuće verovatnoće su

$$\begin{aligned} \text{ver}(E_k \rightarrow E_{k\pm 1}) &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_{(k\pm 1)k}t} V_{(k\pm 1)k}(t) dt \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm i\omega t} qE_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{k\pm 1} dt \right|^2 \\ &= \frac{k\pm 1}{2\hbar m\omega} q^2 E_0^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{t^2}{\tau^2} \pm i\omega t} dt \right|^2 \\ &= \frac{k\pm 1}{2\hbar m\omega} q^2 E_0^2 \tau^2 \pi e^{-\frac{\omega^2 \tau^2}{2}} \end{aligned}$$

U poslednjem koraku, integral smo izračunali koristeći Poisson-ovu formulu (2.249).

7.22 Procenićemo odnos potencijalne energije dipola u magnetnom i električnom polju. U magnetnom polju potencijalna energija je

$$V_B \sim \mu B \sim \frac{e}{mc} r p B,$$

dok je u električnom polju potencijalna energija dipola

$$V_E \sim dE = erE,$$

gde je r karakteristično rastojanje jezgro-elektron. Odnos ove dve veličine je

$$\frac{V_B}{V_E} \sim \frac{p}{mc} \frac{B}{E}$$

Pošto su

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \frac{2A_0\omega}{c} \vec{e} \sin(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}), \quad \vec{B} = \text{rot } \vec{A} = -2A_0 \vec{k} \times \vec{e} \sin(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})$$

imamo da je

$$\frac{V_B}{V_E} \sim \frac{p}{mc} \frac{kc}{\omega} \sim \frac{p}{mc}.$$

Ova procena opravdava primenu dipolne aproksimacije.

7.23 Razmatramo konzervativan sistem čiji hamiltonijan H ima diskretan spektar

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle.$$

Evolucija proizvoljnog stanja data između trenutaka t' i t određena je delovanjem evolucionog operatora

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t')}|\psi(t')\rangle.$$

Stanje u trenutku t je

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)|n\rangle,$$

gde su koeficijenti $a_n(t) = \langle n|\psi(t)\rangle$. Schrödinger-ova jednačina daje da koeficijenti zadovoljavaju diferencijalnu jednačinu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \Rightarrow \sum_n i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_n(t)|n\rangle = \sum_n a_n(t)E_n|n\rangle \Rightarrow \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - E_n\right) a_n(t) = 0$$

Ovo je diferencijalna jednačina prvog reda. Odgovarajuća Green-ova funkcija $G_n(t, t')$ je definisana kao rešenje jednačine

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - E_n\right) G_n(t, t') = \delta(t - t').$$

Lako proveravamo da je

$$G_n(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t')}$$

odgovarajuća Green-ova funkcija, jer je

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - E_n\right) G_n(t, t') &= -\frac{i}{\hbar} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - E_n\right) \theta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t')} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - E_n\right) \theta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t')} \\ &= \delta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t')} - \frac{i}{\hbar} E_n \theta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t')} + \frac{i}{\hbar} E_n \theta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t')} \\ &= \delta(t - t'). \quad \checkmark \end{aligned}$$

Razmotrimo sad Green-ovu funkciju hamiltonijana.

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H\right) G(t, t') = \delta(t - t').$$

Ako uvedemo oznaku $|n, t\rangle = \exp(-iE_n t/\hbar)|n\rangle$ i iskoristimo princip superpozicije rešenje poslednje jednačine možemo da potražimo u obliku

$$G(t, t') = -\frac{i}{\hbar}\theta(t-t') \sum_n |n, t\rangle \langle n, t'|.$$

I zaista imamo da je

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H\right) G(t, t') &= -\frac{i}{\hbar} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H\right) \theta(t-t') \sum_n |n, t\rangle \langle n, t'| \\ &= \delta(t-t') \sum_n |n, t\rangle \langle n, t'| + \theta(t-t') \sum_n \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} |n, t\rangle \langle n, t'|}_{-\frac{i}{\hbar} E_n |n, t\rangle \langle n, t'|} \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \sum_n \underbrace{H |n, t\rangle \langle n, t'|}_{E_n |n, t\rangle \langle n, t'|} \\ &= \delta(t-t') \underbrace{\sum_n |n, t\rangle \langle n, t'|}_I - \frac{i}{\hbar} \sum_n E_n |n, t\rangle \langle n, t'| + \frac{i}{\hbar} \sum_n E_n |n, t\rangle \langle n, t'| \\ &= \delta(t-t'). \quad \checkmark \end{aligned}$$

Kad pomnožimo jednačinu koja definiše Green-ovu funkciju hamiltonijana sleva sa $\langle \vec{r} |$ i sdesna sa $| \vec{r}' \rangle$ dobićemo

$$\langle \vec{r} | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H\right) G(t, t') | \vec{r}' \rangle = \delta(t-t') \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle \Rightarrow \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H\right) G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \delta(t-t') \delta(\vec{r} - \vec{r}'),$$

gde je

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') &= \langle \vec{r} | G(t, t') | \vec{r}' \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \sum_n \langle \vec{r} | n, t \rangle \langle n, t' | \vec{r}' \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t')} \psi_n(\vec{r}) \psi_n^*(\vec{r}') \end{aligned}$$

što je i trebalo pokazati.

7.24 Green-ova funkcija stacionarne Schrödinger-ove jednačine $G(\vec{r}, \vec{r}', E)$ je definisana jednačinom

$$(E - H)G(\vec{r}, \vec{r}', E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'),$$

gde je

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}).$$

U prethodnom zadatku smo proučavali Green-ovu funkciju vremenski zavisne Schrödinger-ove jednačine $G(t, t')$. Napisali smo je u nekoliko različitih oblika, a lako se može pokazati da je možemo napisati i u formi

$$G(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t')} = -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') U(t-t'),$$

gde je U evolucionni operator. Vidimo da je $G(t, t')$ zapravo funkcija jedne promenljive $t - t'$. Vratimo se na $G(\vec{r}, \vec{r}', E) = \langle \vec{r} | G(E) | \vec{r}' \rangle$. Ovde smo uveli operator $G(E)$ koji zadovoljava

$$(E - H)G(E) = I \Rightarrow G(E) = (E - H)^{-1}$$

Taj operator je zapravo Fourriere-ov transform od $G(t - t')$.

$$G(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}Et} G(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t) e^{\frac{i}{\hbar}Et} U(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E-H)t} = -\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E-H)t}}{E-H} \Big|_0^{\infty}.$$

U donjoj granici dobijamo željeni rezultat $(E - H)^{-1}$, ali imamo i član na gornjoj granici (kad $t \rightarrow \infty$). Da bismo njega učinili jednakim 0, možemo postupiti na dva načina: hamiltonijan zamenimo sa $H \rightarrow H - i\epsilon$ ili energiju promenimo sa $E \rightarrow E + i\epsilon$ gde je $\epsilon > 0$ a na kraju stavimo da $\epsilon \rightarrow 0$. Bilo koji od ova dva izbora daje

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon-H)t}}{E+i\epsilon-H} = 0.$$

Dakle, Green-ova funkcija stacionarne Schrödinger-ove jednačine je

$$G(\vec{r}, \vec{r}', E) = \langle \vec{r} | G(E) | \vec{r}' \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t) e^{\frac{i}{\hbar}Et} \langle \vec{r} | G(t) | \vec{r}' \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}Et} G(\vec{r}, \vec{r}', t),$$

čime smo pokazali traženu vezu između Green-ovih funkcija. Ponekad se Green-ova funkcija za vremenski nezavisnu Schrödinger-ovu jednačinu definiše preko jednačine.

$$HG(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'),$$

Ona se dobija iz $G(\vec{r}, \vec{r}', E)$ tako što stavimo da je $E = 0$ i promenimo znak.

7.25 Za jednodimezioni harmonijski oscilator Green-ova funkcija je

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} y\right) e^{-i\omega t(n+\frac{1}{2})}$$

Ovaj izraz ćemo pojednostaviti, Koristeći Kapteyn-ovu formulu

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(u)H_n(v)}{2^n n!} z^n = \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} e^{\frac{2uvz-(u^2+v^2)z^2}{1-z^2}}, \quad 0 < z < 1.$$

Uzećemo najpre da su

$$z = e^{-i\omega t}, \quad u = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad v = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} y,$$

pa je

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_0^{\infty} dt e^{-\frac{u^2+v^2}{2}} \frac{1}{\sqrt{1-z(t)^2}} e^{\frac{2uvz(t)-(u^2+v^2)z(t)^2}{1-z(t)^2}} \sqrt{z(t)}$$

Ovaj izraz možemo dodatno pojednostaviti ako uvedemo nov parametar $\alpha = i\omega t$, onda je $z(t) = e^{-\alpha}$ pa je

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}') &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{\omega\pi\hbar}} \int_0^{\infty} d\alpha \frac{1}{\sqrt{2\operatorname{sh}\alpha}} e^{\frac{uv}{\operatorname{sh}\alpha} - \frac{u^2+v^2}{2} \frac{\operatorname{ch}\alpha}{\operatorname{sh}\alpha}} \\ &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\omega\pi\hbar}} \int_0^{\infty} d\alpha \frac{1}{\sqrt{\operatorname{sh}\alpha}} \exp \frac{2uv(\operatorname{ch}^2 \frac{\alpha}{2} - \operatorname{sh}^2 \frac{\alpha}{2}) - (u^2+v^2)(\operatorname{ch}^2 \frac{\alpha}{2} + \operatorname{sh}^2 \frac{\alpha}{2})}{4\operatorname{sh} \frac{\alpha}{2} \operatorname{ch} \frac{\alpha}{2}} \\ &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\omega\pi\hbar}} \int_0^{\infty} d\alpha \frac{1}{\sqrt{\operatorname{sh}\alpha}} e^{-\frac{m\omega}{4\hbar}((x+y)^2 \operatorname{th}^2 \frac{\alpha}{2} + (x-y)^2 \operatorname{cth}^2 \frac{\alpha}{2})}, \end{aligned}$$

što je i trebalo da se pokaže.