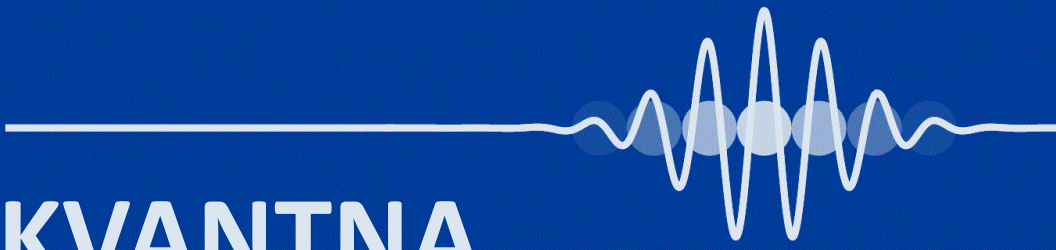
Nenad Simonović • Darko Kapor



KVANTNA MEHANIKA 1

Prirodno-matematički fakultet
Univerzitet u Banjoj Luci

Nenad Simonović i Darko Kapor

KVANTNA MEHANIKA 1

Prirodno-matematički fakultet
Univerzitet u Banjoj Luci
Banja Luka, 2018

Nenad Simonović – Darko Kapor
KVANTNA MEHANIKA 1
prvo izdanje

recenzenti
dr Tasko Grozdanov
naučni savetnik Instituta za fiziku, Beograd
redovni profesor Fizičkog fakulteta, Univerziteta u Beogradu
dr Zoran Ivić
naučni savetnik Instituta za nuklearne nauke "Vinča", Beograd

izdavač
Prirodno-matematički fakultet
Univerzitet u Banjoj Luci

ISBN 978-99955-21-64-6

štampa
"Art Print"
Petra Preradovića 2, Banja Luka

Predgovor

Ovaj udžbenik je namenjen pre svega studentima III godine Odsjeka za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta (PMF) u Banjoj Luci, iako ga mogu koristiti i svi drugi studenti koji rade po sličnom planu i programu. Udžbenik je u potpunosti usaglašen sa planom i programom kursa Kvantna mehanika 1 i usklađen sa sadržajima koje su studenti već upoznali na kursevima Matematičke i Teorijske fizike kao i različitim predmetima vezanim za Eksperimentalnu fiziku.

Rukopis je zasnovan na predavanjima iz Kvantne mehanike koja su na PMF u kontinuitetu od osnivanja Odsjeka do danas držali autori, prvo prof. Kapor a potom prof. Simonović. Na ovim predavanjima i pri pisanju su korišćena iskustva kvalitetnih udžbenika sa univerziteta širom sveta. Na taj način je nastao tekst koji pokušava da ostvari ravnotežu između eksperimentalnih činjenica, njihovog teorijskog tumačenja i primene matematike u svemu tome. U želji da ne preopteretimo tekst, niz digresija namenjenih pre svega radoznalijim studentima je izložen u fusnotama.

Tokom rada smo imali u vidu pitanja koja su studenti postavljali na predavanjima, konsultovali smo po određenim pitanjima kolege sa Odsjeka, a i sami recenzenti su imali niz konstruktivnih primedaba, što je sve doprinelo poboljšanju kvaliteta teksta i stoga im svima najtoplije zahvaljujemo. Autori su svesni da je lako moguće da su se i u konačnoj verziji potkrale određene greške i bićemo zahvalni svim korisnicima knjige ako nam na njih ukažu kako bi one bile ispravljene u kasnijim izdanjima.

Mart 2018. Autori

Sadržaj

1 Uvod **1**

1.1 Priroda svetlosti 1
1.1.1 Razvoj ideje o prirodi svetlosti od XVII do kraja XIX veka . . 1
1.1.2 Ajnštajnova teorija svetlosti. Fotoni 2
1.1.3 Potvrda čestične prirode svetlosti. Komptonov efekat 3
1.1.4 Talasno-čestični dualizam 5
1.2 Stara kvantna teorija 5
1.2.1 Planetarni model atoma i Borova teorija 5
1.2.2 Kvant dejstva 7
1.2.3 Uopštenje Borove teorije 8
1.2.4 Princip korespondencije 9
1.3 Nastanak kvantne mehanike 10
1.3.1 Hajzenbergova kritika stare kvantne teorije i matrična mehanika 11
1.3.2 De Broljeva hipoteza i Šredingerova talasna mehanika 11
1.3.3 Različite formulacije kvantne mehanike 12
1.4 Osnovne ideje i principi kvantne mehanike 13
1.4.1 Talasno-čestični dualizam. Analiza eksperimenta sa dva proreza 13
1.4.2 Kvantno ponašanje 15
1.4.3 Princip neodređenosti i komplementarnost 16
1.4.4 Relacije neodređenosti 17
1.4.5 Stanje kvantnog sistema i princip superpozicije 19
1.4.6 Značaj pojma merenja u kvantnoj mehanici 20
1.4.7 Kvantni ansambli. Čista i mešana stanja 21

2 Matematičke osnove kvantne mehanike **23**

2.1 Vektorski prostori 23
2.1.1 Algebarske strukture 23
2.1.2 Linearna zavisnost vektora i bazis vektorskog prostora 25
2.1.3 Jednoznačnost predstavljanja vektora u bazisu. Izomorfizam prostora 26
2.1.4 Skalarni proizvod i ortogonalnost. Unitarni i Hilbertovi prostori 28
2.1.5 Prostor stanja kvantnog sistema 30
2.2 Linearni operatori 31
2.2.1 Definicija operatora i osnovne operacije sa njima 31
2.2.2 Predstavljanje operatora matricama 32
2.2.3 Osnovne vrste operatora i njihove osobine 33
2.2.4 Svojstveni problem operatora 35

2.2.5 Svojstveni problem ermitskog operatora. Svojstveni bazis. Opservable 36
2.2.6 Neprekidni spektar ermitskog operatora 38
2.2.7 Dirakova delta funkcija 40

3 Osnovni pojmovi i principi kvantne mehanike 43
3.1 Talasna funkcija i njena interpretacija 43
3.1.1 Opis stanja kvantnog sistema pomoću talasne funkcije 43
3.1.2 Kretanje slobodne čestice. Ravni talasi 44
3.1.3 Princip superpozicije 45
3.1.4 Grupna brzina talasa. Talasni paket 46
3.1.5 Statistička interpretacija talasne funkcije 48
3.1.6 Normiranje ravnih talasa u ograničenoj zapremini 51
3.2 Izračunavanje srednjih vrednosti fizičkih veličina 54
3.2.1 Srednja vrednost rezultata merenja, srednje kvadratno odstupanje i standardna devijacija 54
3.2.2 Izračunavanje srednje vrednosti koordinate i veličina koje su funkcije koordinate 56
3.2.3 Izračunavanje srednje vrednosti impulsa 57
3.2.4 Izračunavanje srednje vrednosti funkcije impulsa 59
3.2.5 Srednja vrednost zbira funkcija koordinate i impulsa. Izračunavanje srednje vrednosti energije čestice 60
3.3 Operatori fizičkih veličina 60
3.3.1 Opšti oblik izraza za srednju vrednost 60
3.3.2 Osobine operatora koji opisuju fizičke veličine. Opservable . . 61
3.3.3 Operatori koordinate i impulsa. Multiplikativni i diferencijalni operatori 62
3.3.4 Pridruživanje operatora fizičkim veličinama. Kvantizacija . . 63
3.3.5 Komutacione relacije između komponenti koordinate i impulsa. Osnovni operatori u kvantnoj mehanici 65
3.4 Svojstvena stanja i spektri opservabli 67
3.4.1 Uslov da fizička veličina ima određenu vrednost. Svojstveni problem opservable 67
3.4.2 Moguće vrednosti fizičke veličine i promena stanja kao rezultat merenja 69
3.4.3 Primeri rešavanja svojstvenog problema operatora fizičkih veličina 71
3.4.4 Osobine svojstvenih funkcija opservabli sa diskretnim spektrom 73
3.4.5 Verovatnoća dobijanja određene vrednosti fizičke veličine iz diskretnog spektra 76
3.4.6 Osobine svojstvenih funkcija opservabli sa neprekidnim spektrom 77
3.4.7 Verovatnoća dobijanja vrednosti iz neprekidnog spektra . . . 80

3.4.8 Primeri normiranja svojstvenih funkcija opservabli sa neprekidnim spektrom . . . 81
3.4.9 Istovremeno merenje više fizičkih veličina. Kompatibilne opservable . . . 82
3.4.10 Relacije neodređenosti . . . 83
3.4.11 Određivanje stanja kvantnih sistema. Kompletan skup kompatibilnih opservabli . . . 84

4 Promena stanja kvantnog sistema sa vremenom i stacionarna stanja 87
4.1 Šredingerova jednačina . . . 87
4.1.1 Opšti uslovi koje treba da ispunjava jednačina evolucije kvantnog stanja . . . 87
4.1.2 Šredingerova jednačina za česticu u datom potencijalu . . . 88
4.1.3 Veza sa klasičnom mehanikom . . . 90
4.1.4 Održanje norme talasne funkcije, gustina struje verovatnoće i jednačina kontinuiteta . . . 90
4.1.5 Promena stanja kvantnog sistema . . . 92
4.2 Stacionarna stanja i opšte rešenje Šredingerove jednačine . . . 93
4.2.1 Razdvajanje promenljivih. Stacionarna stanja . . . 93
4.2.2 Opšte rešenje Šredingerove jednačine . . . 95
4.2.3 Promena srednje vrednosti fizičke veličine sa vremenom . . . 96
4.3 Jednodimenzioni kvantni sistemi. Primeri rešavanja Šredingerove jednačine . . . 97
4.3.1 Čestica u asimetričnoj pravougaonoj potencijalnoj jami . . . 98
4.3.2 Pravougaona potencijalna jama sa simetričnim zidovima . . . 103
4.3.3 Beskonačno duboka pravougaona potencijalna jama . . . 104
4.3.4 Potencijalni prag . . . 106
4.3.5 Potencijalna barijera. Tunel efekat . . . 108
4.3.6 Linearni harmonijski oscilator . . . 111

5 Čestica u centralnosimetričnom potencijalu. Teorija orbitalnog ugaonog momenta 115
5.1 Šredingerova jednačina za česticu u centralnosimetričnom potencijalu 115
5.1.1 Hamiltonijan čestice u polju centralnih sila . . . 115
5.1.2 Šredingerova jednačina u sfernim koordinatama i razdvajanje radijalne od ugaonih promenljivih . . . 117
5.2 Teorija orbitalnog ugaonog momenta . . . 118
5.2.1 Komutacione relacije . . . 118
5.2.2 Svojstveni problem operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$. Razdvajanje promenljivih . . . 119
5.2.3 Rešenja jednačine za funkciju Θ u slučaju $m = 0$ . . . 120
5.2.4 Rešenja jednačine za funkciju Θ za proizvoljno m . . . 122
5.2.5 Sferni harmonici . . . 125
5.2.6 Parnost sfernih harmonika . . . 125

5.3 Radijalni problem 126
5.3.1 Opšta teorija 126
5.3.2 Rešavanje radijalne jednačine za Kulonov potencijal. Diskretni energijski spektar atoma sa jednim elektronom 127
5.3.3 Svojstvene funkcije vezanih stanja atoma sa jednim elektronom 130

Bibliografija **135**

Indeks **137**

1 Uvod

Krajem XIX veka u fizici su postojale dve zaokružene i gotovo nezavisne teorije koje su opisivale dva osnovna vida egzistencije materije – supstancu (čestice, tela, višečestične sisteme, fluide) i zračenje (svetlost i elektromagnetne talase uopšte).[1] To su Njutnova mehanika i Maksvelova elektrodinamika. Međutim, za mnoge pojave, posebno za one koje se javljaju na atomskim i subatomskim dimenzijama, nije bilo moguće naći zadovoljavajuće objašnjene u okviru ovih teorija. Teškoće su naročito bile velike kada se radilo o pojavama čiji opis je zahtevao angažovanje obeju teorija (apsorpcija i emisija zračenja iz atoma, zračenje apsolutno crnog tela, fotoelektrični efekat, itd.). Neslaganje između eksperimentalnih rezultata i postojećih teorija je ukazivalo na potrebu izgradnje nove teorije, primenljive na atomskoj skali, koja bi zahtevala fundamentalnu izmenu nekih od osnovnih fizičkih koncepata i zakona. Na drugoj strani neuspeh eksperimenata čiji je cilj bio potvrda teorije etra[2] doveo je do novih interpretacija u elektrodinamici vezanih za prostiranje elektromagnetnih talasa, promene u poimanju prostora i vremena i formulacije novih principa relativnosti. Tako su se početkom XX veka u fizici pojavile dve revolucionarne ideje – kvantna mehanika i relativistička mehanika. U novom okruženju klasična fizika se pojavljuje kao njihova aproksimacija koja može na zadovoljavajući način da opiše makroskopske sisteme i njihovu dinamiku pri brzinama mnogo manjim od brzine svetlosti. Nove teorije su značajno doprinele sprezanju gore pomenutih fundamentalnih oblasti fizike – mehanike i elektrodinamike. Međutim, kvantna i relativistička mehanika su u velikoj meri ostale nezavisne i do danas nije formirana potpuno zadovoljavajuća teorija koja objedinjava relativističke i kvantne fenomene.

1.1 Priroda svetlosti

1.1.1 Razvoj ideje o prirodi svetlosti od XVII do kraja XIX veka

Na nastanak kvantne mehanike je posebno uticao razvoj ideje o prirodi svetlosti. Ova ideja se nekoliko puta menjala u poslednjih nekoliko vekova varirajući između dve osnovne koncepcije – talasne i čestične. Dekart (René Descartes, XVII vek) je smatrao da svetlost predstavlja neku vrstu spoljašnjeg impulsa (pritiska) koji vrše svetleća tela na transparentnu sredinu i da se prostire kroz nju slično zvučnim talasima. Iako je

[1] Ovde treba napomenuti da se u anglosaksonskoj literaturi pod materijom obično podrazumeva samo supstanca, a za zračenje (fizičko polje) se često koristi i izraz energija.

[2] Do kraja XIX veka u fizici je bila aktuelna hipoteza o etru – medijumu koji ispunjava ceo prostor i omogućava prostiranje elektromagnetnih talasa. Danas je ova hipoteza potpuno odbačena.

pogrešno pretpostavljao da se svetlost prostire brže u gušćim sredinama, on je u suštini korektno objasnio prelamanje svetlosti kao posledicu različite brzine u različitim sredinama. Njutn (Isac Newton, XVII vek) je s druge strane smatrao da svetlost predstavlja snop čestica, čime je mogao da objasni njeno pravolinijsko prostiranje i refleksiju. Međutim, ovom pretpostavkom nije bilo moguće objasniti i fenomen difrakcije, tako da je Njutn dozvolio mogućnost da čestice svetlosti mogu formirati lokalizovane talase u etru. Iako su Huk (Robert Hooke) i Hajgens (Christiaan Huygens) u XVII veku podržavali talasnu teoriju svetlosti, Njutnova reputacija je uticala da čestična (korpuskularna) teorija svetlosti ostane dominantna praktično do kraja XVIII veka.

Početkom XIX veka, zahvaljujući radovima Janga (Thomas Young), Ojlera (Leonhard Euler), Frenela (Augustin-Jean Fresnel) i drugih, počinje da preovladava talasna teorija svetlosti. Izvodeći eksperimente sa difrakcijom, Jang je uočio pojavu interferencije (1803), čime je potvrđeno da se svetlost ponaša kao talas. Ustanovljeno je da je u pitanju transverzalan talas na osnovu čega je bilo moguće objasniti polarizaciju svetlosti. U drugoj polovini XIX veka, inspirisan Faradejevim radom (Michael Faraday), Maksvel (James Clerk Maxwell) je predstavio svoju elektromagnetnu teoriju svetlosti (1862-4) i nešto kasnije (1873) potpun sistem jednačina koje opisuju elektromagnetno polje, poznate kao Maksvelove jednačine. Nešto više od jedne decenije nakon toga Herc (Heinrich Hertz, 1887) je potvrdio Maksvelovu teoriju eksperimentalno generišući i detektujući radio talase u laboratoriji. Ovo je praktično dovelo do uključenja optike u elektrodinamiku gde je brzina svetlosti c u vakuumu izražena preko električnih i magnetnih konstanti ($c^2 = 1/\varepsilon_0\mu_0$).

1.1.2 Ajnštajnova teorija svetlosti. Fotoni

Početkom XX veka, zbog razloga pomenutih u uvodnom delu, došlo je do ponovnog preispitivanja ideje o prirodi svetlosti i drugih osnovnih fizičkih koncepata. Tako je ispitivanje zračenja apsolutno crnog tela, koje nije moglo biti objašnjeno klasičnom elektrodinamikom, navelo Planka (Max Planck, 1900) da uvede *hipotezu o kvantima energije*. Prema Planku, energija oscilatora (atoma apsolutno crnog tela) frekvencije ν se može menjati emisijom odnosno apsorpcijom zračenja samo u celobrojnim umnoščima kvanata $h\nu$, gde je h fundamentalna (Plankova) konstanta čija je vrednost kasnije eksperimentalno određena ($h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Js). Polazeći od ove pretpostavke Plank je uspeo da dobije izraz za gustinu energije zračenja u funkciji frekvencije (ili talasne dužine) koji se, za razliku od prethodnih teorija kao što je bila klasična Rejli-Džinsova (Rayleigh-Jeans) teorija, dobro slagao sa eksperimentalnim rezultatima.

Sledeći korak u razvoju ideje o kvantima je načinio Ajnštajn (Albert Einstein) iste godine kada je objavio i svoju specijalnu teoriju relativnosti (1905). Ajnštajn je smatrao da Plankovu ideju o kvantovanju energije treba uopštiti i na proces prostiranja svetlosti (pored apsorpcije i emisije). Prema njemu, svetlost (elektromagnetno zračenje) se sastoji od snopa čestica (kasnije nazvanih "fotoni") od kojih svaki ima energiju

$$E = h\nu. \tag{1.1}$$

Ajnštajn je ovu pretpostavku uveo da bi objasnio fotoelektrični efekat, pojavu koju su otkrili i ispitivali Herc (1887) i Lenard (P. Lenard, 1902). Efekat se sastoji u tome da svetlost izbacuje elektrone sa površine metala, pri čemu se to dešava samo ako je talasna dužina svetlosti manja od neke granične vrednosti. Intenzitet upadnog zračenja ne utiče na pojavu efekta. Takođe, kada efekat postoji, energija fotoelektrona je nezavisna od intenziteta ali se linearno menja sa frekvencijom zračenja. Ovakvo ponašanje nije moglo biti objašnjeno klasičnom elektrodinamikom. Ajnštajnova pretpostavka, međutim, daje objašnjenje za sve navedene činjenice:[3] Apsorpcija pojedinačnog kvanta povećava energiju elektrona za $h\nu$ i, ukoliko je frekvencija dovoljno velika, energija elektrona postaje veća od tzv. izlaznog rada A (tj. energije potrebne za napuštanje potencijalne jame metalne rešetke). Elektron tada napušta metal sa kinetičkom energijom koja je na osnovu zakona održanja $\frac{1}{2}m_e v^2 = h\nu - A$. Očigledno, efekat se javlja samo ukoliko je $\nu \geq A/h$.

Ajnštajn je dalje razvijao svoju teoriju svetlosti uvodeći impuls fotona (1916). Polazeći od njegove čuvene formule za vezu između mase m i energije E tela, $E = mc^2$, relativistički izraz za impuls (količinu kretanja) se može napisati u obliku $p = mv = Ev/c^2$. Kako je za svetlost $v = c$, sledi da je impuls fotona $p = E/c$.[4] Konačno, koristeći formulu za energiju fotona (1.1), dobija se

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}, \tag{1.2}$$

gde je $\lambda = c/\nu$ talasna dužina. Pošto je impuls vektorska veličina, pogodno je uvesti talasni vektor $\mathbf{k}$ čiji je intenzitet (tzv. talasni broj) $k \equiv |\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$, a pravac mu se poklapa sa pravcem postiranja svetlosti (elektromagnetnog zračenja). Tada se relacije koje povezuju čestična (energija i impuls) i talasna svojstva svetlosti (frekvencija i talasna dužina odnosno talasni vektor) mogu napisati u obliku

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \tag{1.3}$$

gde je $\hbar = h/2\pi$ tzv. redukovana Plankova konstanta, a $\omega = 2\pi\nu$ kružna frekvencija.

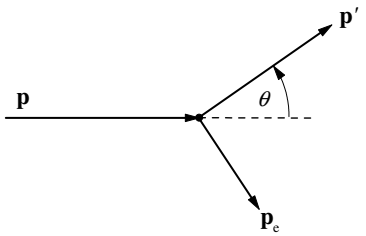
1.1.3 Potvrda čestične prirode svetlosti. Komptonov efekat

Direktna potvrda čestične prirode elektromagnetnog zračenja (tj. egzistencije fotona) je dobijena iz eksperimenata koje je izvršio Kompton (Arthur H. Compton) 1923-4. On je otkrio da se zračenje date talasne dužine (u domenu X-zraka) propušteno kroz metalnu foliju rasejava pod različitim uglovima ϑ, pri čemu se njegova talasna dužina menja u funkciji tog ugla. Utvrđeno je da promena talasne dužine rasejanog

[3] Ajnštajn je za objašnjenje fotoelektričnog efekta dobio Nobelovu nagradu za fiziku 1921.

[4] Pretpostavka da se fotoni kreću brzinom c, koja prema teoriji relativnosti predstavlja gornju granicu za brzine koje materijalni objekti mogu da imaju, ekvivalentna je pretpostavci da fotoni nemaju masu mirovanja ($m_0 = 0$). Iako je ova pretpostavka i dalje predmet ispitivanja, većina savremenih teorija u fizici uzima da to striktno važi. Iz tog razloga relativistički izraz za impuls $p = mv = m_0 v/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ nije primenljiv na fotone. Međutim, formula koja povezuje energiju i impuls $E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$ direktno daje $p = E/c$.

zračenja u odnosu na talasnu dužinu upadnog zračenja zavisi od ugla rasejanja kao $1 - \cos\vartheta$. Ovaj rezultat nije bilo moguće objasniti klasičnom teorijom elektromagnetnog zračenja. Kompton je, međutim, pokazao da se navedena zavisnost dobija ukoliko se upadno zračenje tretira kao snop fotona energije $h\nu$ koji se elastično rasejavaju na pojedinačnim elektronima.



Slika 1.1. Rasejanje fotona impulsa $\mathbf{p}$ na elektronu. Nakon sudara foton odlazi sa izmenjenim impulsom $\mathbf{p}'$, a elektron dobija impuls $\mathbf{p}_e = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$.

Posmatrajmo foton energije $h\nu$ i impulsa $\mathbf{p}$ usmerenog ka elektronu u (približnom) mirovanju (slika 1.1). Nakon sudara foton odlazi sa izmenjenom energijom $h\nu'$ i impulsom $\mathbf{p}'$, a elektron dobija impuls $\mathbf{p}_e$. Pri tome se energija elektrona uvećava sa $m_e c^2$ na $(m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2)^{1/2}$, gde je m_e masa mirovanja elektrona. Veza između vrednosti energije i impulsa pre i posle sudara se dobija iz zakona održanja energije i impulsa

$$h\nu + m_e c^2 = h\nu' + (m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2)^{1/2}, \quad \mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{p}_e. \tag{1.4}$$

Iz izraza za održanje energije sledi

$$\begin{aligned} p_e^2 c^2 &= (h\nu - h\nu' + m_e c^2)^2 - m_e^2 c^4 \\ &= h^2(\nu - \nu')^2 + 2m_e c^2 h(\nu - \nu') \\ &= h^2\nu^2 + h^2\nu'^2 - 2h^2\nu\nu' + 2m_e c^2 h(\nu - \nu'). \end{aligned} \tag{1.5}$$

Na drugoj strani, izraz za odražanje impulsa daje $\mathbf{p}_e^2 = (\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2 = \mathbf{p}^2 + \mathbf{p}'^2 - 2\mathbf{p}\cdot\mathbf{p}'$, odnosno $p_e^2 = p^2 + p'^2 - 2p\,p'\cos\vartheta$. Koristeći izraz (1.2) za impuls fotona, odavde imamo

$$p_e{}^2 c^2 = h^2\nu^2 + h^2\nu'^2 - 2h^2\nu\nu'\cos\vartheta. \tag{1.6}$$

Izjednačavajući desne strane izraza (1.5) i (1.6) sledi

$$m_e c^2 h(\nu - \nu') = h\nu\nu'(1 - \cos\vartheta). \tag{1.7}$$

Deleći obe strane jednačine sa $\nu\nu'$ dobija se $m_e c(\lambda' - \lambda) = h(1 - \cos\vartheta)$, odnosno

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos\vartheta), \tag{1.8}$$

što je u skladu sa eksperimentalno utvrđenom zavisnošću. Veličina $h/m_e c = 2,426 \cdot 10^{-12}$ m se naziva Komptonova talasna dužina.

1.1.4 Talasno-čestični dualizam

Uspeh čestične teorije svetlosti (fotoefekat, Komptonov efekat) i, sa druge strane, eksperimenti koji ukazuju na tipično talasno ponašanje (difrakcija, interferencija) dovode nas do zaključka da nijedan od ova dva prilaza nije moguće odbaciti, tj. da se kompletna interpretacija ponašanja svetlosti može dobiti jedino uzimajući u obzir i talasni i čestični aspekt. Neophodno je, dakle, prihvatiti da *svetlost ima dvojnu prirodu*. Formalna veza između čestičnih i talasnih svojstava svetlosti je određena Ajnštajnovim relacijama (1.1) i (1.2) odnosno (1.3). Pri tome, različiti aspekti ponašanja dolaze do izražaja u različitim situacijama. Tako je u principu prostiranje svetlosti talasna pojava, dok emisija i apsorpcija imaju čestični karakter. U poglavljima koja slede ćemo videti kako treba razumeti ovaj dualizam.

1.2 Stara kvantna teorija

Osvrćući se na 1900-tu godinu, možemo reći da je Plankov zakon zračenja apsolutno crnog tela predstavljao začetak prve kvantne teorije u savremenoj fizici, danas poznate kao *stara kvantna teorija*. Njegova ideja o promeni energije oscilatora u diskretnim iznosima je ubrzo, uz određene modifikacije, primenjena i na druga periodična kretanja, pre svega na kretanje elektrona u atomu. Ovoj primeni je prethodilo otkriće jezgra i planetarne strukture atoma.

1.2.1 Planetarni model atoma i Borova teorija

Raderford (Ernest Rutherford, 1911) je analizirajući rasejanje alfa čestica na tankoj metalnoj foliji[5] došao do zaključka da atom ima pozitivno naelektrisano jezgro u kome je koncentrisana većina mase atoma, suprotno do tada važećem Tomsonovom modelu (J. J. Thompson). U Raderfordovom modelu atoma elektroni se kreću oko jezgra analogno planetama oko Sunca, pri čemu ulogu gravitacione sile u atomu vrši privlačna Kulonova sila između jezgra i elektrona. Raderford je zaključio da se rasejanje alfa čestica ne dešava na elektronima (pošto su oni suviše malih masa) već na jezgru. Pri tome, s obzirom na veliki gradijent potencijala u okolini jezgra zbog njegovih malih dimenzija, uglovi rasejanja mogu biti veoma veliki, što je za jedan broj alfa čestica u eksperimentu i utvrđeno.

Raderfordov planetarni model, međutim, nije mogao da objasni stabilnost atoma kao ni apsorpciju odnosno emisiju zračenja iz atoma. Prema klasičnoj elektrodinamici elektroni bi morali neprekidno da zrače, zbog čega bi gubili energiju i "padali" ka jezgru po spiralnim putanjama. Zbog toga bi se frekvencija revolucije elektrona oko jezgra, a time i frekvencija emitovanog elektromagnetnog zračenja (koje su po klasičnoj elektrodinamici jednake), sve više povećavala. Ovo je u oštroj suprotnosti sa činjenicom da atomski sistemi u normalnim uslovima imaju svoje karakteristične

[5] Rezultati eksperimenta koji su izvršili Gajger i Marsden (H. Geiger, E. Marsden) pod Raderfordovim rukovodstvom su objavljeni 1909. godine.

dimenzije i energije vezivanja elektrona. Eksperimenti su, osim toga, pokazali da atomski apsorpcioni i emisioni spektri imaju linijsku strukturu, što je značilo da dati atom apsorbuje i emituje zračenje samo određenih talasnih dužina.

Razmatrajući Raderfordov model, Bor (Niels Bohr, 1913) je došao do zaključka da su navedene poteškoće, slično kao kod problema zračenja apsolutno crnog tela, posledica neadekvatnosti klasične elektrodinamike pri opisu atomskih sistema. Da bi ih prevazišao, on je postavio dodatne empirijske uslove (postulate) koji se odnose na kretanje elektrona u atomu. Prva Borova pretpostavka je da u atomu postoje tzv. *stacionarne orbite* na kojima elektroni, suprotno zakonima klasične elektrodinamike, ne emituju elektromagnetno zračenje. Stacionarne orbite, međutim, nisu moguće ukoliko važe zakoni klasične elektrodinamike. Iz tog razloga Bor prihvata suštinsku pretpostavku Plankove teorije, a to je da se zračenje iz atomskog sistema ne emituje na neprekidan način, kao što se podrazumeva u klasičnoj elektrodinamici, već da se odvija u jasno odvojenim emisijama – *kvantima*. Borovi postulati se obično formulišu na sledeći način:

1. U atomskim sistemima postoje stacionarna stanja koja se razlikuju po energi i drugim veličinama i u njima atom niti apsorbuje niti emituje zračenje.

2. Atom emituje ili apsorbuje zračenje samo pri prelasku iz jednog stacionarnog stanja (energije E_m) u drugo (energije E_n). Pri tome se apsorbuje ili emituje zračenje frekvencije ν određeno razlikom njihovih energija

$$h\nu = |E_n - E_m|. \tag{1.9}$$

3. Stacionarna stanja odgovaraju kružnim elektronskim orbitama na kojima je moment količine kretanja elektrona jednak celobrojnom umnošku redukovane Plankove konstante[6]

$$l = m_e v r = n\hbar \quad (n = 1, 2, \ldots). \tag{1.10}$$

Iako su ovi postulati, očigledno, u oštroj suprotnosti sa klasičnom teorijom, Bor je pomoću njih uspeo da objasni strukturu i spektar atoma vodonika i jednoelektronskih

[6]Bor je originalno definisao stacionarne orbite kao keplerovske trajektorije na koje elektron prelazi iz beskonačnosti u procesu vezivanja za jezgro i pri tome gubi energiju emisijom zračenja *fiksne frekvencije* ν (tzv. homogeno zračenje) u okviru jednog ili više kvanata $h\nu$. Uzimajući da se frekvencija revolucije elektrona povećava od nule (kada je on u beskonačnosti) do vrednosti ν_e koja odgovara posmatranoj stacionarnoj orbiti, Bor je zaključio da frekvencija homogenog zračenja mora imati neku vrednost između 0 i ν_e. Pretpostavljajući da je $\nu = \nu_e/2$ i kombinujući ovaj "specijalni" uslov sa klasičnom relacijom koja povezuje frekvenciju ν_e i energiju elektrona na keplerovskoj orbiti, on je uspeo da korektno reprodukuje energijski spektar i poluprečnik vodonikovog atoma. Kasnije je uočio da je moguće dati jednostavniju interpretaciju dobijenih rezulatata preko momenta impulsa elektrona na stacionarnim orbitama ukoliko se pretpostavi da su one kružne. U tom slučaju iz uslova da elektron pri vezivanju gubi iznos energije $nh\nu_e/2$ (n kvanata $h\nu$ ili jedan kvant $nh\nu$) direktno sledi da je njegov moment impulsa na stacionarnoj orbiti jednak $l = n\hbar$. (Analiza problema kvantovanja stacionarnih orbita kod atoma sa jednim elektronom je predstavljena u prvom delu tzv. Borove trilogije: N. Bohr, "On the Constitution of Atoms and Molecules", Phil. Mag., **26**, 1 (1913).)

jona (tzv. vodoniku sličnih atoma). Kombinujući prvi postulat, tj. uslov (1.10), sa klasičnim uslovom za kružno kretanje elektrona oko jezgra (beskonačne mase) čije je naelektrisanje Z

$$\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r}, \tag{1.11}$$

dobijaju se brzine i poluprečnici Borovih orbita

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z}{\hbar n}, \quad r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\frac{\hbar^2 n^2}{m_e Z}. \tag{1.12}$$

Poluprečnik prve Borove orbite za atom vodonika ($Z = 1$) se naziva Borov radijus ($a_0 = r_1 = 5,292 \cdot 10^{-11}$ m). Iz izraza (1.12) se dobijaju i energije stacionarnih stanja

$$E_n = \frac{1}{2}m_e v^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{m_e}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{Z^2}{\hbar^2 n^2}. \tag{1.13}$$

Zamenjujući dalje ovaj izraz za energije u relaciju (1.9) dobija se poznata Ridbergova (J. Rydberg) formula (određena empirijski 1888) za talasne dužine zračenja koje apsorbuje odnosno emituje atom sa jednim elektronom

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_m - E_n}{hc} = R_Z\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right), \quad R_Z = \frac{m_e}{2hc}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}\right)^2. \tag{1.14}$$

R_Z je Ridbergova konstanta za vodoniku sličan atom sa jezgrom koje sadrži Z protona. Prema tome, Borovim modelom je bilo moguće potpuno reprodukovati prethodno poznate spektroskopske podatke za atom vodonika i jednoelektronske jone (He^+, Li^{++}, itd.). Postojanje diskretnih energijskih nivoa u atomu je ubrzo (1914) i direktno potvrđeno Frank-Hercovim (J. Franck, G. L. Hertz) eksperimentom.

1.2.2 Kvant dejstva

Plankova pretpostavka da se energija oscilatora sopstvene frekvencije ν može menjati samo u celobrojnim umnošcima kvanta $h\nu$ u suštini određuje energijski spektar oscilatora. Moguće energije (energijski nivoi) harmonijskog oscilatora su prema tome[7]

$$E = nh\nu, \tag{1.15}$$

gde je $n = 0, 1, 2, \ldots$ tzv. kvantni broj. Ovde treba naglasiti da ovaj kvantni uslov nije primenljiv u slučajevima kada je frekvencija oscilovanja (ili rotacionog kretanja) funkcija energije oscilatora (rotatora). Jedan takav primer je periodično kretanje elektrona u polju atomskog jezgra čiji su energijski nivoi, kao što smo videli, korektno

[7] Danas je poznato da su energijski nivoi harmonijskog oscilatora ustvari $E_n = h\nu(n + \frac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2, \ldots$. Na postojanje tzv. energije nulte tačke (Nullpunktsenergie (nem.), zero-point energy (eng.)) oscilatora $E_0 = h\nu/2$, tj. da je najniža moguća energija (energija osnovnog stanja) kvantnog oscilatora različita od nule, prvi put su ukazali Ajnštajn i Štern (Otto Stern) 1913.

određeni u okviru Borove teorije. Pokazuje se, međutim, da ako se kvantni uslov (1.15) preformuliše u oblik u kome frekvencija oscilatora ne figuriše eksplicitno, onda se on može primeniti i na druge sisteme.

Kao što je poznato energija linearnog harmonijskog oscilatora, izražena preko koordinate x i impulsa p, glasi

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \tag{1.16}$$

gde je $\omega = 2\pi\nu$. Uočimo da se ovaj izraz može prepisati u obliku $x^2/a^2 + p^2/b^2 = 1$, gde su $a = \sqrt{2E/m\omega^2}$ i $b = \sqrt{2mE}$, odakle je očigledno da su fazne trajektorije oscilatora elipse sa poluosama čiji su kvadrati proporcionalni energiji oscilatora. Prema tome, oblast (površina) faznog prostora ograničena faznom trajektorijom oscilatora, koja zapravo predstavlja integral dejstva (akcije) u toku jednog perioda, iznosi $S = \pi ab = E/\nu$. Kombinujući ovaj izraz sa Plankovim izrazom za energiju oscilatora (1.15) sledi da se uslov kvantovanja može predstaviti u obliku

$$S = nh. \tag{1.17}$$

Tumačenje ovog uslova je da se (pri apsorpciji ili emisiji zračenja) dejstvo koje odgovara jednom periodu oscilatora može menjati isključivo u celobrojnim umnošcima Plankove konstante. Iz tog razloga se Plankova konstanta često naziva *kvant dejstva*. Kvantni uslov (1.17), s obziom da u njemu ne figuriše frekvencija oscilatora, je opštiji od uslova (1.15) i može se primeniti na proizvoljno periodično kretanje.

1.2.3 Uopštenje Borove teorije

Interpretirajući energijske nivoe atoma preko "dozvoljenih" elektronskih orbita, čiji momenti impulsa uzimaju vrednosti određene uslovom (1.10), Bor je zapravo oveo kvantni uslov koji je analogan uslovu (1.17). Naime, ako sistem vrši periodično kretanje koje je u faznom prostoru opisano promenom koordinate q i kanonički konjugovanog impulsa p, onda je dejstvo u toku jednog perioda određeno integralom $S = \oint p\,dq$. Za elektron koji se kreće oko jezgra po kružnoj orbiti poluprečnika r pogodno je kao koordinatu izabrati azimutni ugao φ. Kanonički konjugovan impuls koji odgovara ovoj koordinati je moment impulsa elektrona, $p_\varphi = m_e r^2\dot{\varphi} \equiv l$, koji je integral (konstanta) kretanja, tako da je dejstvo u toku jednog perioda $S = \oint p_\varphi\,d\varphi = l\int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi l$. Primenjujući kvantni uslov (1.17) na ovaj izraz neposredno sledi Borov kvantni uslov (1.10).

Borov model je ubrzo unapređen od strane Zomerfelda (Arnold Sommerfeld) uvođenjem eliptičnih elektronskih orbita i odgovarajućih kvantnih uslova (tzv. prostorno kvantovanje), na osnovu čega je npr. bilo moguće objasniti Zemanov (P. Zeeman) efekt i uvesti pojam degeneracije. Međutim, ova teorija nije bila u mogućnosti da opiše spektre i strukturu višeelektronskih atoma. Pokazalo se da kod sistema sa više stepeni slobode ona daje dobre rezultate samo u slučaju kada je klasično kretanje

separabilno, tj. kada postoji skup koordinata koje su u odgovarajućim jednačinama kretanja potpuno razdvojene (matematički raspregnute). Drugim rečima, da bi se teorija mogla primeniti na sistem od N stepeni slobode, mora da postoji skup koordinata q_i, $i = 1, \ldots, N$ u kome se kretanje razlaže na N jednodimenzionih periodičnih kretanja. U tom slučaju, ako su p_i kanonički konjugovani impulsi, odgovarajući, tzv. Vilson-Zomerfeldovi (W. Wilson) kvantni uslovi glase[8]

$$\oint p_i dq_i = n_i h, \quad i = 1, \ldots, N, \tag{1.18}$$

gde su kvantni brojevi n_i celi brojevi, a integrali se uzimaju u toku jednog perioda odgovarajuće (i-te) komponente kretanja. Pri tome periodi različitih komponenti kretanja ne moraju biti isti, čak mogu biti i nesamerljivi (tzv. kvaziperiodične orbite). Kvantni uslovi (1.18), uključujući i jednodimenzioni slučaj ($N = 1$), često se nazivaju i Bor-Zomerfeldovim kvantnim uslovima.

1.2.4 Princip korespondencije

Uprkos nedostacima stare kvantne teorije, poznavanje njenih osnovnih elemenata može nam pomoći da jasnije sagledamo kasniji razvoj teorije. Tako je Bor još u okviru stare kvantne teorije (1923) formulisao tzv. *princip korespondencije* koji je igrao suštinsku ulogu u razvoju kvantne mehanike. Princip tvrdi da kvantna teorija prelazi u klasičnu teoriju u graničnim slučajevima kada ova druga postaje primenljiva. Iz svakodnevnog iskustava je očigledno da klasična teorija važi u makroskopskom domenu. Tada su vrednosti fizičkih veličina koje opisuju dinamiku mnogo veće od vrednosti odgovarajućih kvanata (npr. $S \gg h$ ili $E \gg h\nu$) i kvantni efekti praktično ne dolaze do izražaja. Prema tome, klasična teorija u principu važi u graničnim slučajevima gde se kvantni diskontinuiteti mogu smatrati beskonačno malim. Drugi primer je mikroskopski sistem u slučaju velikih kvantnih brojeva (tada je $S = nh \gg h$ odnosno $E = nh\nu \gg h\nu$, pošto je $n \gg 1$). U svim ovakvim graničnim slučajevima predviđanja kvante teorija se moraju poklapati sa onima u klasičnoj teoriji. Pošto su predmet izučavanja kvantne mehanike u principu sistemi na atomskoj i subatomskoj skali, princip se obično izražava u sledećem obliku: Rezultati kvantne teorije moraju asimptotski da konvergiraju rezultatima klasične teorije u limitu velikih kvantnih brojeva.

Razmotrimo kao primer frekvenciju zračenja koje emituje atom sa jednim elektronom prelazeći sa orbite sa kvantnim brojem $n + 1$ na orbitu sa kvantnim brojem n, pri čemu je n veoma veliko. Elektron koji se kreće po kružnoj orbiti poluprečnika r

[8] Uz izvesne korekcije stara kvantna teorija je i danas u upotrebi kao aproksimativna (semiklasična) tehnika u kvantnoj mehanici. Pokazuje se da tzv. WKB kvantni uslovi $\oint p_i dq_i = h(n_i + \mu_i/4)$, $i = 1, \ldots, N$, koji se dobijaju uvođenjem Maslovljevih indeksa μ_i u kvantne uslove (1.18), daju zadovoljavajuće rezultate u opštem slučaju separabilnog sistema, a naročito za velike vrednosti kvantnih brojeva n_i. Maslovljev indeks μ_i predstavlja broj promena znaka impulsa p_i u toku jednog perioda odgovarajuće (i-te) komponente kretanja. Očigledno za rotaciono kretanje je $\mu_i = 0$ dok je za oscilovanje $\mu_i = 2$ (što daje već pomenutu korekciju $h\nu/2$ na energijske nivoe (1.15), tj. energiju nulte tačke).

brzinom v prema klasičnoj elektrodinamici treba da emituje elektromagnetno zračenje te iste frekvencije, tj. $\omega_{\mathrm{kl}} = v/r$. Ako je u pitanju n-ta Borova orbita biće

$$\omega_{\mathrm{kl}} = \frac{v_n}{r_n} = m_e\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{Z^2}{\hbar^3 n^3}. \tag{1.19}$$

S druge strane, kružna frekvencija zračenja pri prelazu $m \to n$ je

$$\omega_{m\to n} = \frac{\Delta E}{\hbar} = \frac{m_e}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{Z^2}{\hbar^3}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right). \tag{1.20}$$

Ako je $m = n + 1$ i $n \gg 1$ sledi $1/n^2 - 1/m^2 = (2n + 1)/[n^2(n + 1)^2] \approx 2/n^3$, odakle za prelaz $n + 1 \to n$ dobijamo

$$\omega_{n+1\to n} \approx \omega_{\mathrm{kl}}, \tag{1.21}$$

tj. frekvencija zračenja emitovana sa visokopobuđenog nivoa na susedni niži nivo jednaka je frekvenciji koja bi se dobila prema klasičnoj elektrodinamici.

Princip u suštini pretpostavlja da postoji formalna analogija između klasične i kvantne teorije, što npr. omogućava definisanje procedure kvantizacije fizičkih veličina. S druge strane on se može koristiti i kao sredstvo za izbor i proveru principa i rezultata kvantne teorije koji odgovaraju stvarnosti, zahtevajući da oni kao granični slučaj reprodukuju klasičnu mehaniku. Formalno, ovaj tzv. klasični limit se može postići uzimajući da Plankova konstanta teži nuli. Kao posledica toga npr. rastojanje između diskretnih energijskih nivoa teži nuli tako da diskretni spektar prelazi u kontinualan. Pokazuje se, međutim, da ovaj prelaz nije trivijalan (za razliku npr. od prelaza sa relativističke na nerelativističku mehaniku u graničnom slučaju malih brzina) pošto osnovni pojam u savremenoj kvantnoj mehanici, tzv. funkcija stanja, u klasičnom limitu divergira.

Na kraju ovog kratkog pregleda možemo zaključiti da je stara kvantna teorija, pored značajnih rezultata, imala niz nedostataka i da nikada nije zaokružena kao kompletna teorija. Može se reći da se ona ustvari sastoji od skupa dodatnih (kvantnih) uslova koji predstavljaju korekciju klasične mehanike, a kojima se obezbeđuje slaganje teorije sa eksperimentalnim činjenicama. Stara kvantna teorija, međutim, ne daje suštinske razloge za uvođenje kvantnih uslova. Da bi se njihova suština razumela, a takođe prevazišla ograničenja teorije, pokazalo se da je neophodno ići dalje i potpuno odustati od nekih fundamentalnih principa klasične teorije.

1.3 Nastanak kvantne mehanike

Nastanak kvantne mehanike se može smestiti u period između 1923. i 1927. godine. Gotovo u isto vreme su bile predstavljene dve ekvivalentne formulacije: Hajzenbergova matrična mehanika (Werner Heisenberg, 1925) i Šredingerova talasna mehanika (Ervin Schrödinger, 1926). Polazana tačka matrične mehanike bila je kritička analiza stare kvantne teorije dok je talasnu mehaniku Šredinger razvio polazeći od de Brolјeve (Louis de Broglie) teorije o talasima materije.

1.3.1 Hajzenbergova kritika stare kvantne teorije i matrična mehanika

Prema Hajzenbergu u svakoj fizičkoj teoriji se moraju razlikovati veličine i pojmovi koje je moguće (bar u principu) posmatrati od onih za koje je to neizvodljivo. Da bi se izgradila zadovoljavajuća teorija, treba zadržati ove prve (zvaćemo ih opservabilnim veličinama odnosno pojmovima) dok drugi moraju biti odbačeni ili izmenjeni. U staroj kvantnoj teoriji, međutim, postoji niz pojmova koji se koriste bez eksperimentalnog pokrića. Takav je npr. pojam elektronske trajektorije (orbite) u atomu. Da bi se ona eksperimentalno odredila potrebno je izvršiti niz uzastopnih merenja položaja elektrona. Pri tome je za dobro definisanu orbitu neophodno da tolerancija (neodređenost) rezultata merenja bude mnogo manja od srednjeg radijusa orbite a. Ovakva merenja je u principu moguće izvesti X-zracima dovoljno male talasne dužine λ, tj. ukoliko je $\lambda \ll a$. Međutim, u skladu sa Komptonovim efektom, sudar svakog fotona X-zračenja sa elektronom je propraćen prenosom impulsa reda veličine $h/\lambda \gg h/a$. Ova perturbacija posmatranog sistema od strane mernog uređaja očigledno ograničava preciznost poznavanja elektronske orbite.[9] U slučaju malih kvantnih brojeva perturbacija je tako velika da orbitu nije moguće ni grubo odrediti. Tada, prema Hajzenbergu, pošto nijedan eksperiment ne može da potvrdi da elektron opisuje preciznu orbitu u atomu, ništa nas ne sprečava da napustimo sam pojam trajektorije.

Polazeći isključivo od opservabilnih veličina kao što su frekvencije i intenziteti zračenja emitovanih iz atoma, matrična mehanika Hajzenberga, Borna (Max Born) i Jordana (Pascual Jordan) pridružuje svakoj fizičkoj veličini izvesnu matricu. Suprotno veličinama u klasičnoj fizici, matrice se pokoravaju pravilima nekomutativne algebre koja omogućava korektan matematički opis kvantnih pojava. Nekomutiranje određenih fizičkih veličina je jedna od suštinskih karakteristika po kojoj se nova mehanika razlikuje od klasične mehanike. Jednačine kretanja dinamičkih promenljivih kvantnog sistema su u ovom slučaju matrične jednačine, koje su na osnovu principa korespondencije formalno identične jednačinama odgovarajućeg klasičnog sistema (čije promenljive komutiraju).

1.3.2 De Broljeva hipoteza i Šredingerova talasna mehanika

Pokušavajući da uopšti Borovu ideju i primeni je na atome koji su složeniji od vodonika, de Brolj je došao na ideju da se talasno-čestični dualizam, koji je zahvaljujući Ajnštajnu kod svetlosti definitivno bio prihvaćen, proširi na elektron i sve druge čestice. Pretpostavka je bila da se, analogno svetlosti (tj. fotonima), sve čestice, poput elektrona, zapravo prostiru pomoću talasa u koji su inkorporirane. De Brolj je tako 1924. u okviru svoje doktorske teze postavio *hipotezu o korpuskularno-talasnoj (dualističkoj) prirodi svih čestica materije*. Prema njemu, relacije (1.1)-(1.3) koje povezuju čestična i talasna svojstva svetlosti važe za sve čestice i uopšte za sva

[9] Ograničenje preciznosti merenja je nametnuto samom prirodom stvari, tj. konačnom vrednošću interakcije između posmatranog objekta i mernog instrumenta. Problemi praktične realizacije merenja, kao što je instrumentalna greška, se ovde ne uzimaju u obzir.

tela. Tako npr. iz relacije (1.2) sledi da je talasna dužina tzv. de Broljevog talasa pridruženog čestici impulsa p jednaka

$$\lambda = \frac{h}{p}. \tag{1.22}$$

De Broljeva hipoteza na jednostavan način objašnjava kvantovanje elektronskih orbita u atomu vodonika. Ako se elektron kreće po kružnoj orbiti poluprečnika r, da bi orbita bila stacionarna, potrebno je da se na njoj formira stojeći de Broljev talas. Uslov za to je da obim orbite bude jednak celobrojnom umnošku njegove talasne dužine

$$2r\pi = n\lambda, \quad n = 1, 2, \ldots. \tag{1.23}$$

Izražavajući talasnu dužinu λ preko impulsa elektrona $p = m_e v$ pomoću relacije (1.22), iz poslednjeg uslova se dobija $2r\pi = nh/m_e v$, odnosno Borov kvantni uslov (1.10).

Eksperimentalna potvrda talasnih svojstava elektrona je dobijena 1927. godine Dejvison-Džermerovim (C. J. Davisson, L. H. Germer) eksperimentom.[10] U eksperimentu je posmatrana difrakcija elektrona na monokristalu nikla, čija kristalna rešetka igra ulogu difrakcione rešetke. Pojava difrakcionih maksimuma pri refleksiji elektrona na površini kristalne rešetke, slično kao pri refleksiji X-zraka, potvrdila je da se snop elektrona pri tome ponaša kao talas. Sredinom XX veka je eksperimentalno potvrđena i difrakcija težih čestica kao što su neutroni. Najmasivnije čestice sa kojima je do kraja XX veka izveden difrakcioni eksperiment i potvrđeno talasno ponašanje su fulereni koji se sastoje od 60 atoma ugljenika (C_{60}).

Sledeći de Broljevu ideju Šredinger je krenuo u potragu za talasnom jednačinom čija bi rešenja pravilno opisivala talasne osobine datog mehaničkog sistema. Do ove fundamentalne jednačine on je uspeo da dođe rukovodeći se analogijom između mehanike i optike te koristeći princip korespondencije. Rešenja Šredingerove jednačine su tzv. talasne funkcije (funkcije stanja ili psi-funkcije kako ih je sam Šredinger zvao) i one u talasnoj mehanici, za razliku od de Broljeve interpretacije, nemaju realnu prirodu. Talasna funkcija je matematički entitet koji opisuje talasni aspekt materije, koji u takvoj interpretaciji ima formalan karakter. Born je dao probabilistički smisao talasnoj funkciji povezujući je, kako ćemo videti, sa verovatnoćom nalaženja čestice.

1.3.3 Različite formulacije kvantne mehanike

U prvo vreme, neposredno po predstavljanju teorija, između Hajzenberga i Šredingera dolazi do nerazumevanja usled različitih polaznih stavova i suprotstavljenih interpretacija. Međutim, na Borovu inicijativu, na sastancima koje je on organizovao

[10] Nezavisno od njih Tomson mlađi (G. P. Thomson, sin J. J. Thomson-a) je iste godine izveo sličan eksperiment sa rasejanjem elektrona na tankim folijama od različitih materijala, među kojima su neki imali monokristalnu, a drugi polikristalnu strukturu (objavljeno 1928. godine). Rezultati dobijeni za oba tipa materijala su potvrdili talasno ponašanje elektrona. Tomson i Dejvison su za ove rezultate 1937. godine dobili Nobelovu nagradu za fiziku.

u Kopenhagenu, kroz žučne diskusije među najpoznatijim fizičarima tog vremena dolazi do postepenog usaglašavanja mišljenja. Uskoro se uvidelo da su talasna i matrična mehanika ekvivalentne i da predstavljaju dve formulacije kvantne mehanike koja se može predstaviti u veoma opštem obliku. Izgradnja tog opšteg formalizma je u najvećoj meri bila Dirakova (P. A. M. Dirac) zasluga. Tako je dobijena nerelativistička kvantna teorija supstancijalnih (masenih) čestica koja, dopunjena kvantnom teorijom elektromagnetnog polja, čini koherentnu celinu pogodnu za tretman problema vezanih za mikroskopske mehaničke sisteme koji interaguju sa elektromagnetnim poljem. Tzv. statistička interpretacija Kopenhagenske škole, čiji su najrevnosniji zagovornici bili Bor, Hajzenberg i Born, je nakon mnogobrojnih kontroverzi konačno dobila podršku velike većine fizičara. Međutim, ona je imala (i još uvek ima) izvestan broj tvrdih oponenata, među kojima su bili Ajnštajn, Šredinger i de Brolj.

Od mnogobrojnih načina da se uvede kvantna mehanika Dirakov opšti prilaz je svakako najelegantniji. Međutim, on sa jedne strane zahteva vladanje odgovarajućim matematičkim formalizmom, dok sa druge strane zbog svoje apstraktnosti nosi rizik od zaklanjanja fizičke suštine. Prilaz i matematički aparat koje koristi talasna mehanika se pokazao pristupačnijim za prvo upoznavanje sa kvantnom mehanikom. Osim toga ova formulacija kvantne mehanike se najčešće koristi u konkretnim izračunavanjima i primenama. Mi ćemo u prvom delu ovog kursa (Kvantna mehanika 1) slediti ovaj prilaz dok ne steknemo određeno iskustvo i usvojimo matematički aparat potreban za opštiji prilaz.

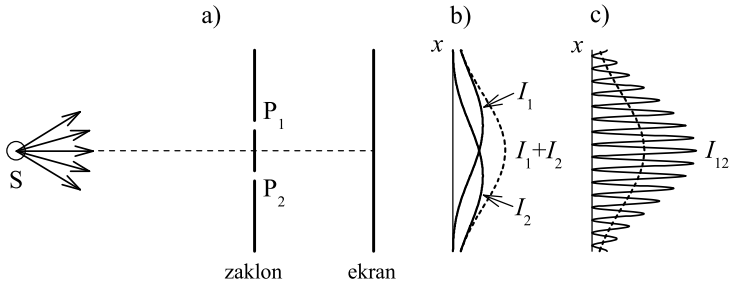
1.4 Osnovne ideje i principi kvantne mehanike

U ovom delu ćemo koristeći fenomenološki prilaz uvesti i analizirati neke od osnovih ideja i principa kvantne mehanike. Poćićemo od analize Jangovog eksperimenta sa dva proreza i demonstrirati kako se naizgled isključive koncepcije talasa i čestice mogu pomiriti uvođenjem fundamentalnih kvantnih principa. Predstavićemo verziju eksperimenta sa fotonima, imajući u vidu da ne bi bilo suštinske razlike ako bi se isti eksperiment izveo sa elektronima ili sa nekim drugim česticama.

1.4.1 Talasno-čestični dualizam. Analiza eksperimenta sa dva proreza

Neka se monohromatska svetlost emituje iz izvora S i pada na zaklon sa dva uska proreza P_1 i P_2 (slika 1.2). Deo svetlosti koja prolazi kroz proreze detektuje se na ekranu (npr. foto-ploča). $I_1(x)$ i $I_2(x)$ su distribucije intenziteta dobijene nakon difrakcije svetlosti u slučaju kada je samo jedan od proreza (P_1 odnosno P_2) otvoren. Kada su oba proreza istovremeno otvorena na ekranu (detektoru) se dobija distribucija u obliku interferencionog obrasca $I_{12}(x)$ koji se bitno razlikuje od sume distribucija $I_1(x)$ i $I_2(x)$:

$$I_{12}(x) \neq I_1(x) + I_2(x). \tag{1.24}$$



Slika 1.2. a) Skica Jangovog eksperimenta sa dva proreza. Distribucije intenziteta svetlosti na ekranu: b) I_1 i I_2 u slučaju kada je samo jedan od proreza (P_1 odnosno P_2) otvoren i c) I_{12} kada su oba proreza istovremeno otvorena. Distribucija I_{12} (interferencioni obrazac) se bitno razlikuje od sume distribucija I_1 i I_2.

Talasna teorija svetlosti daje korektnu interpretaciju dobijenih difrakcionih obrazaca. Intenzitet svetlosti u svakoj tački ekrana je proporcionalan kvadratu amplitude električnog polja u toj tački. Ako su $E_1(x)$ i $E_2(x)$ vrednosti električnog polja (u kompleksnoj notaciji) elektromagnih talasa u tački x koji se prostiru iz proreza P_1 i P_2 (kao sekundarnih izvora), rezultujuće polje u toj tački (kada su oba proreza otvorena) je $E(x) = E_1(x) + E_2(x)$. Intenzitet svetlosti u tački x je tada

$$I_{12}(x) \sim |E(x)|^2 = |E_1(x) + E_2(x)|^2. \tag{1.25}$$

Pošto su intenziteti $I_1 \sim |E_1(x)|^2$, $I_2 \sim |E_2(x)|^2$, iz prethodne formule sledi da se $I_{12}(x)$ i $I_1(x) + I_2(x)$ razlikuju do na interferencioni član $\sim E_1^*(x)E_2(x) + E_1(x)E_2^*(x)$ koji zavisi od fazne razlike između $E_1(x)$ i $E_2(x)$ i čije prisustvo objašnjava oscilacije u distribuciji I_{12}. Očigledno, prema ovoj teoriji, smanjenje intenziteta izvora S će imati za posledicu samo smanjenje intenziteta difrakcionog obrasca na ekranu ali ne i promenu njegovog oblika.

Ovaj fenomen se, međutim, u stvarnosti ne opaža na opisani način. U eksperimentu se uvek detektuju pojedinačni fotoni tako da se distribucije $I_1(x)$, $I_2(x)$ odnosno $I_{12}(x)$ ustvari dobijaju interpolacijom nakon detekcije velikog broja fotona. Ako npr. umesto ekrana stavimo foto-ploču, što veći broj fotona bude padao na nju distribucija će sve više dobijati kontinualni karakter, i to oblika $I_{12}(x)$ ako su oba proreza otvorena. Može se reći da pojedinačni fotoni, kako pristižu, grade interferencioni obrazac. Ako je, umesto toga, u prvoj polovini vremena ekspozicije otvoren samo prorez P_1, a u drugoj samo prorez P_2 fotoni će izgraditi interferencioni obrazac $I_1(x) + I_2(x)$. Prema tome, može se zaključiti da emisija i apsorpcija svetlosti (što uključuje i detekciju) imaju čestični karakter, dok je njeno prostiranje talasna pojava koja konačno određuje i distribuciju fotona koji padaju na ekran.

Postavlja se pitanje da li bi dobijeni rezultati mogli biti objašnjeni potpuno u okviru korpuskularne teorije. Difrakcija na svakom od proreza bi se npr. mogla objasniti rasejanjem fotona (kao čestica) na ivicama proreza. Međutim, detaljnija ana-

liza bi pokazala da je ova pretpostavka nedovoljna za korektan opis. Još veći problem predstavlja tumačenje distribucije $I_{12}(x)$. U okviru korpuskularne teorije mogli bismo pokušati da ovu distribuciju objasnimo interakcijom između fotona koji prolaze kroz prorez P_1 i fotona koji prolaze kroz prorez P_2. Ova pretpostavka dovodi do sledećeg zaključka: Ukoliko se intenzitet izvora S (broj fotona emitovanih u jedinici vremena) toliko smanji da fotoni padaju na ekran jedan po jedan,[11] interakcija među njima više ne postoji i trebalo bi očekivati da interferencioni obrazac potpuno izostane. To se, međutim, ne dešava. Ako umesto ekrana stavimo foto-ploču i povećamo vreme ekspozicije toliko da je fotografijom zahvaćen veliki broj fotona, nakon razvijanja uočićemo da interferencioni obrazac nije isčezao. Prema tome, čisto korpuskularna interpretacija prema kojoj je I_{12} posledica interakcije među fotonima mora biti odbačena. S druge strane, ekpozicija foto-ploče može biti tako kratka da je na njoj zahvaćeno samo nekoliko fotona. U tom slučaju, umesto veoma slabog interferencionog obrasca, na snimku se vide pogoci pojedinačnih fotona čija raspodela izgleda potpuno slučajna. Očigledno je, dakle, da čisto talasna interpretacija takođe nije prihvatljiva. Prema tome, nijedna od pomenutih interpretacija pojedinačno ne može da opiše eksperimentalne rezultate kompletno.

1.4.2 Kvantno ponašanje

Na osnovu gore izloženog mogli bismo reći da u okviru čestične teorije rezultat eksperimenta sa dva proreza, kada izvor emituje *jedan po jedan* foton, dovodi do *paradoksa*. Naime, pošto je svaka mogućnost interakcije među fotonima isključena nije jasno zašto bi se rezultat eksperimenta drastično promenio u zavisnosti od toga da li su oba proreza istovremeno otvorena ili naizmenično jedan pa drugi. Štaviše nije jasno kako je u prvom slučaju, pod takvim okolnostima, uopšte moguće dobiti distribuciju $I_{12}(x)$ (interferencioni obrazac). Na koji način (kojim putem) u tom slučaju fotoni stižu od izvora do detektora? Dobija se paradoksalan odgovor da svaki foton prolazi istovremeno kroz oba proreza i interferira sa samim sobom.

Primetimo da u originalnom eksperimentu, kada su oba proreza otvorena, nismo u mogućnosti da odredimo kroz koji od njih foton prolazi pre nego što stigne do detektora. Ako pokušamo da to saznamo stavljajući npr. detektor iza jednog od proreza, detektovani foton će biti apsorbovan i situacija će samim merenjem biti promenjena pošto taj foton neće stići do ekrana. Detaljnija analiza pokazuje da je nemoguće konstruisati verziju eksperimenta koja daje interferencioni obrazac i u isto vreme informaciju kroz koji od proreza je svaki foton prošao.

Ako se ova informacija u principu ne može dobiti iz eksperimenta (merenjem), nameće se zaključak da je tada besmisleno i postavljati pitanje o tome kojim putem fotoni (kao klasične čestice) stižu do detektora.[12] Ovakvo pitanje bi podrazumevalo

[11] Ova varijanta eksperimenta u vreme nastanka kvantne mehanike nije bila realno izvodljiva, pa se tada govorilo o tzv. misaonom eksperimentu. Međutim, kasnije je razvoj tehnologije omogućio emisiju i detekciju pojedinačnih čestica tako da su od kraja XX veka ovakvi eksperimeni izvodljivi (videti niže).

[12] Ovo je ustvari poznati Hajzenbergov stav o opservabilnim i neopservabilnim veličinama o kome je bilo reči u prethodnom poglavlju (Nastanak kvantne mehanike).

da se u prirodi nešto dešava nezavisno od opservera. U kvantnoj fizici, međutim, *kvantni objekat i merni instrument čine suštinski povezan sistem.* Ono što se dešava sa ispitivanim objektom ne zavisi samo od njega, već presudno i od interakcije sa mernim uređajem. Kada se merenje vrši na mikroskopskom sistemu, interakcija sa mernim instrumentom se ne može proizvoljno redukovati (informacija o stanju sistema se npr. dobija razmenom energije ili impulsa sa mernim uređajem, koja ne može biti manja od jednog kvanta) tako da se stanje sistema suštinski remeti, dakle u principu nije isto pre i nakon izvršenog merenja.[13]

Prema tome, da bi se paradoks razrešio neophodno je odustati od ideje da foton neminovno prolazi kroz pojedinačni prorez. Ovim se praktično odustaje od pojma trajektorije čestice kao fundamentalnog koncepta klasične fizike. Umesto toga možemo govoriti o verovatnoći pojavljivanja (detektovanja) čestice u nekoj tački prostora u datom trenutku. Npr. u eksperimentu sa dva proreza verovatnoća da foton padne u tačku x na ekranu je proporcionalna intenzitetu svetlosti koji je na osnovu talasne teorije $\sim |E(x)|^2$. Ovim se očigledno determinizam klasične mehanike, gde početni uslovi potpuno određuju kretanje čestice, zamenjuje probabilističkim (stohastičkim) pristupom. Iz svega izloženog proizilazi da moramo prihvatiti da koncepti klasične fizike, iako nam svakodnevno iskustvo nalaže da ih smatramo dobro utemeljenim, nisu primenljivi u mikroskopskom domenu i da je neophodno prihvatiti drugačije principe koji će biti u skladu sa *kvantnom prirodom* mikrosveta. U daljem izlaganju ćemo fizički sistem čije se osobine i ponašanje ne može objasniti u aproksimaciji klasične fizike, već je za to neophodna kvantna mehanika, zvati *kvantni sistem*.

Kao što smo naglasili na početku analize eksperimenta sa dva proreza, isti eksperiment bi se mogao razmatrati i sa drugim česticama, npr. sa elektronima. Na osnovu de Broljeve teorije rezultati moraju biti ekvivalentni, tako da zaključke vezane za kvantno ponašanje fotona možemo uopštiti i na druge čestice. Razlika je, naravno, u prirodi talasa koji su pridruženi fotonima odnosno drugim česticama. Realan eksperiment sa snopom elektrona je izveden 1959. godine (G. Möllenstedt i C. Jönsson), a kasnije i sa drugim česticama. Rezultati su u svim slučajevima potvrdili očekivano ponašanje. Među skorijim rezultatima treba pomenuti eksperiment ovog tipa koji je izveo Tonomura (A. Tonomura, 1989) sa elektronima koji su se emitovali iz izvora jedan po jedan. Eksperiment predstavlja najbližu realizaciju eksperimenata sa dva proreza koji smo analizirali i njime je potpuno potvrđeno opisano ponašanje.

1.4.3 Princip neodređenosti i komplementarnost

Kao što smo već naglasili, proces merenja u kvantnoj mehanici uvek utiče na objekat merenja (kvantni sistem) i u principu, za datu tačnost merenja, ovaj efekat nije moguće proizvoljno smanjiti. Što je tačnije merenje to je jači njime uzrokovan efekat, i samo u merenjima veoma male tačnosti efakat na mereni objekat može biti mali.

[13] U klasičnoj fizici se, s druge strane, uticaj merenja na (makroskopski) objekat prećutno zanemaruje pošto se interakcija između ispitivanog objekta i mernog instrumenta može načiniti tako malom u odnosu na sam sistem da se može smatrati infinitezimalnom.

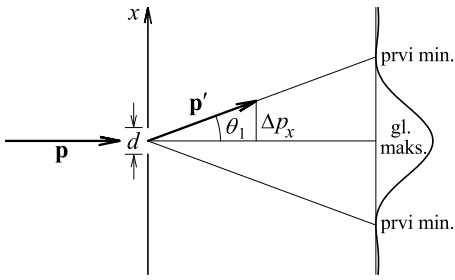
Ovo čini suštinu onoga što se zove princip neodređenosti, jedan od osnovnih principa kvantne mehanike, koji je otkrio Hajzenberg (1927).

Videli smo da u Jangovom eksperimentu, kada su oba proreza otvorena, eksperimentalni uređaj omogućava merenje talasnog aspekta (interferencije) dok čestični aspekt, koji se sastoji u izboru putanje kroz jedan od proreza, ostaje potpuno neodređen (možemo reći i neostvaren). Obrnuto, ako se merenjem utvrdi kroz koji od dva proreza čestica prolazi, dolazi do razaranja interferencije. Na osnovu ovog i niza drugih primera Hajzenberg je došao do *principa neodređenosti* koji bi se mogao formulisati u sledećem opštem obliku: Postoje aspekti ponašanja kvantnih sistema koji su u takvom odnosu da poznavanje (merenje) jednog drugi čini nužno neodređenim. Prema ovom principu, za pojedine parove fizičkih veličina (promenljivih) koje opisuju ponašanje kvantnog sistema nemoguće je odrediti precizno i istovremeno vrednosti obe veličine.

Bor je govorio i o komplementarnosti aspekata (odnosno fizičkih promenljivih). Za jedan aspekt ponašanja kvantnog objekta obično postoji više drugih aspekata tako da važi princip neodređenosti. Ako se merenje dva aspekta u istom eksperimenu potpuno isključuje onda su oni *komplementarni*. Talasno-čestični dualizam je tipičan primer komplementarnosti. Komplementarnost se ustvari može smatrati i kao uopštenje ovog dualizma.

1.4.4 Relacije neodređenosti

Relacije neodređenosti izražavaju princip neodređenosti u kvantitativnoj formi. One se mogu izvesti analizirajući sledeći primer. Posmatrajmo paralelan, monohromatski i koherentni snop svetlosti koji pada normalno na dijafragmu sa uskim prorezom. Deo snopa koji prolazi kroz prorez će na ekranu koji se nalazi iza dijafragme formirati difrakcioni obrazac sa izraženim glavnim maksimumom i slabijim sekundarnim maksimumima (slika 1.3). Analogno će se dešavati i sa snopom elektrona ili nekih drugih čestica.



Slika 1.3. Difrakcija snopa čestica na dijafragmi sa prorezom. Neodređenost položaja čestica propuštenog dela snopa odgovara širini proreza d, dok se neodređenost njihovih impulsa može proceniti na osnovu širine glavnog difrakcionog maksimuma.

Ako je upadni snop određen talasnim vektorom $\mathbf{k}$, a prorez ima širinu d, intenzitet rasejanog snopa kao funkcija ugla devijacije θ je dat formulom

$$I(\theta) = I_0\left(\frac{\sin\alpha}{\alpha}\right)^2, \tag{1.26}$$

gde je $\alpha = (\pi d/\lambda)\sin\theta$ i $\lambda = 2\pi/|\mathbf{k}|$. Minimumi intenziteta se javljaju kada je $\alpha = \pm n\pi$ ($n = 1, 2, \ldots$), tj. pri uglovima $\pm\theta_n$ određenim uslovom $d\sin\theta_n = n\lambda$. Nakon difrakcije najveći broj čestica pada oko glavnog maksimuma, pri čemu u oblast između prvih minimuma, tj. u interval uglova θ određen uslovom

$$|\sin\theta| < \sin\theta_1 \equiv \frac{\lambda}{d}, \tag{1.27}$$

odlazi više od 90% intenziteta upadnog snopa.

Izaberimo x-osu tako da bude normalna na pravac upadnog snopa i pri tome da leži u pravcu širine proreza (slika 1.3). Pre prolaska čestice kroz prorez komponenta njenog impulsa $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ u x-pravcu je $p_x = 0$, tj. ima tačno određenu vrednost. Možemo reći da je neodređenost ove komponente impulsa $\Delta p_x = 0$. S druge strane sama koordinata x je tada potpuno neodređena jer čestica može pasti u bilo koju tačku na dijafragmi. Za čestice koje prođu kroz prorez na dijafragmi situacija se menja. Umesto potpune neodređenosti koordinate x imamo konačnu (malu) neodređenost $\Delta x = d$, ali posledica toga je narušavanje tačnog poznavanja komponente impulsa p_x. Naime, čestice nakon prolaska kroz prorez, kao rezultat difrakcije, dobijaju komponentu impulsa u x-pravcu sa slučajnim vrednostima $p_x = p\sin\theta$ (pri čemu je $p = |\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'|$) prevashodno iz intervala određenim uslovom (1.27). Neodređenost impulsa je prema tome $\Delta p_x \approx p\sin\theta_1 \equiv h/d$. Uočimo da neodređenost x-komponente impulsa raste obrnuto proporcionalno sa smanjenjem širine proreza d, tj. sa smanjenjem neodređenosti koordinate x. Dobija se, dakle, relacija

$$\Delta x\,\Delta p_x \approx h. \tag{1.28}$$

Prema Hajzenbergu, čin ograničavanja čestice u oblast širine Δx duž x pravca rezultuje neodređenošću odgovarajuće komponente impulsa Δp_x tako da je $\Delta x\,\Delta p_x$ jednako ili veće nekoj konstanti. (Znak $\geq$ se pojavljuje iz razloga što je uvek moguće uvesti dodatne izvore neodređenosti iza fundamentalnog limita.)

Precizna definicija neodređenosti fizičke veličine je standardna devijacija rezultata koji se dobijaju pri merenju te veličine. Ovako definisana neodređenost komponente impulsa daje nešto užu meru, tako da se relacije neodređenosti dobijaju u obliku (izvođenje je dato u glavi 3)

$$\Delta x\,\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta y\,\Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z\,\Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{1.29}$$

1.4.5 Stanje kvantnog sistema i princip superpozicije

Iz prethodne analize smo videli da ponašanje fotona i drugih čestica nije determinističko (kao u klasičnoj fizici) već je probabilističko, pri čemu talasni aspekt omogućava izračunavanje verovatnoće. Kad je reč o fotonu, elektromagnetni talas, koji je rešenje Maksvelovih jednačina, nosi informaciju o njemu u svakom trenutku t pa možemo reći da ovaj talas karakteriše stanje fotona u datom trenutku.[14] Pri tome je dovoljno posmatrati samo jednu njegovu komponetu, npr. električno polje $E(\mathbf{r}, t)$. Tada se $E(\mathbf{r}, t)$ može interpretirati kao amplituda verovatnoće pojavljivanja fotona u tački $\mathbf{r}$ u trenutku t, što znači da je odgovarajuća verovatnoća proporcionalna $|E(\mathbf{r}, t)|^2$.

Za razliku od fotona, talasni aspekt kod drugih čestica se ne može dovesti u vezu sa nekim merljivim fizičkim poljem. Moglo bi se reći da on obuhvata sve one osobine i ponašanje čestice koje je čine drugačijom u odnosu na česticu u klasičnoj fizici, pri čemu je ta razlika opisana i protumačena po analogiji sa dvojnom prirodom svetlosti. Prema tome, očekujemo da se kvantne osobine i ponašanje elektrona (ili neke druge čestice nenulte mase mirovanja) mogu opisati nekom funkcijom $\psi(\mathbf{r}, t)$ koja predstavlja analogon elektromagnetnog talasa kod fotona. Ova tzv. *talasna funkcija* zapravo karakteriše *kvantno stanje* čestice. Pokazuje se da je ona suštinski kompleksna funkcija za razliku od $E(\mathbf{r}, t)$, gde se kompleksna notacija koristi isključivo iz praktičnih razloga (fizički smisao ima realni deo od $E(\mathbf{r}, t)$). Po toj analogiji talasna funkcija $\psi(\mathbf{r}, t)$ se interpretira kao amplituda verovatnoće pojavljivanja čestice u tački $\mathbf{r}$ u trenutku t, a odgovarajuća verovatnoća je propocionalna kvadratu njenog modula $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ koji je, za razliku od amplitude, pozitivna realna veličina.

Ovde treba pomenuti još jedan od fundamentalnih principa (pored principa neodređenosti) vezanih za talasni aspekt i uopšte kvantno ponašanje – *princip superpozicije*. Ovaj princip kaže da superpozicija dva različita stanja kvantnog sistema predstavlja takođe neko stanje istog sistema. Tako npr. u Jangovom eksperimentu, kada smo sigurni da foton ide jednim od dva moguća optička puta, možemo govoriti o određenom stanju fotona. Ne ulazeći u matematički opis, ovo stanje se može definisati kao pripadnost snopu fotona koji se prostire jednim od pomenutih puteva. Kada se foton prostire i jednim i drugim putem istovremeno onda kažemo da su odgovarajuća dva stanja superponirana u novo stanje (tzv. koherentna mešavina stanja). U slučaju svetlosti princip superpozicije je posledica linearnosti Maksvelovih jednačina: ako su E_1 i E_2 dva rešenja jednačina, tada je i $E = c_1E_1 + c_2E_2$, gde su c_1 i c_2 proizvoljne konstante, takođe rešenje ovih jednačina. Tumačenje talasnih fenomena u fizičkoj optici (difrakcija, interferencija) se upravo zasniva na ovom principu. Analogija u ponašanju snopa fotona i drugih čestica u situacijama kada do izražaja dolazi njihov talasni aspekt ukazuje na to da princip superpozicije mora da važi u opštem slučaju.

Kao posledica važenja principa superpozicije u kvantnoj mehanici sledi da, ako postoji jednačina čija su rešenja talasne funkcije koje opisuje kvantna stanja, onda ona mora biti linearna. Ovo je jedan od bitnih argumenta koji je u vreme formiranja kvantne mehanike ukazivao na oblik koji treba da ima Šredingerova talasna jednačina.

[14] Precizna definicija kvantnog stanja fotona se može dati samo u okviru kvantne elektrodinamike.

Pomenimo ovde da opis stanja kvantnog sistema pomoću talasne funkcije nije i jedini mogući način. Kad budemo dovoljno ušli u formalizam kvantne mehanike videćemo da se kvanta stanja u najopštijem obliku predstavljaju pomoću vektora iz nekog apstraktnog beskonačnodimenzionog (tzv. Hilbertovog) prostora, a da su talasne funkcije u tom kontekstu tzv. koordinatna reprezentacija ovih vektora.

1.4.6 Značaj pojma merenja u kvantnoj mehanici

U odeljku 1.4.2 smo videli da razrešenje paradoksa nastalih prihvatanjem talasno-čestičnog dualizma zahteva radikalnu promenu slike u mehanici. Odsustvo određene trajektorije čestice, koje samo po sebi predstavlja dramatičnu razliku između klasične i kvantne predstave o čestici, lišava je samim tim i određenih dinamičkih karakteristika kao što su položaj, brzina, impuls, itd. Prema tome, jasno je da bi za sistem koji se sastoji samo iz kvantnih objekata bilo potpuno nemoguće konstruisati neku logički prihvatljivu teoriju. Mogućnost kvantitativnog opisa kretanja elektrona zahteva takođe prisustvo fizičkog objekta koji se sa dovoljnom tačnošću ponaša po zakonima klasične mehanike. Ako elektron interaguje sa takvim "klasičnim objektom", stanje ovog poslednjeg se takođe menja. Karakter i veličina te promene zavisi od stanja elektrona i, prema tome, može da posluži kao njegova kvantitativna karakteristika. U tom smislu takav "klasični objekat" se obično naziva "instrument", a o procesu njegove interakcije sa kvantnim objektom govorimo kao o *merenju*. Može se, dakle, zaključiti da se dinamičke karakteristike kvantnog sistema ispoljavaju isključivo kao rezultat nekog merenja i da bez toga one zapravo nisu ostvarene. Ovakvo tumačenje predstavlja stav već pomenute Kopenhagenške škole (v. odeljak 1.3.3) koja je među različitim interpretacijama kvantne mehanike ostala najšire prihvaćena.[15] U toj interpretaciji se promena stanja kvantnog sistema pri merenju, koja dovodi do ispoljavanja određenih osobina sistema, tumači interakcijom tog sistema sa mernim instrumentom, dok uloga posmatrača kao spoznajnog subjekta nije eksplicitno uključena u teoriju, mada se njegovo prisustvo podrazumeva.[16] Konačno možemo zaključiti da je odnos između klasične i kvantne mehanike u najmanju ruku neobičan. Naime, kvantna mehanika sadrži klasičnu mehaniku kao granični slučaj (princip korespondencije), dok u isto vreme ona zahteva taj granični slučaj za svoju sopstvenu formulaciju (pojam merenja fizičke veličine). Rasvetljavanje važnosti pojma merenja u kvantnoj mehanici se u najvećoj meri može pripisati Boru.

[15] Za razliku od "ortodoksnih" sledbenika Kopenhagenške škole, tzv. "realisti", među kojima je Ajnštajn svakako bio najuticajniji, smatraju da kvantni sistemi u svakom trenutku imaju potpuno određene sve dinamičke karakteristike, ali da kvantna mehanika kao nepotpuna teorija nije u mogućnosti da to opiše.

[16] I po ovom pitanju postoje drugačija mišljenja. Tako npr. fon Nojman (John von Neumann), koji se smatra najzaslužnijim za postavljanje rigoroznog matematičkog okvira kvantne mehanike, u svojoj knjizi "The Mathematical Foundations of Quantum Mechanics" zaključuje da matematička pozadina kvantne mehanike dozvoljava da se promena stanja pri merenju može dovesti u vezu sa nizom mogućih uzroka, od mernog uređaja do subjektivne percepcije posmatrača.

1.4.7 Kvantni ansambli. Čista i mešana stanja

Iako je glavni zadatak kvantne mehanike da opiše ponašanje i osobine pojedinačnih kvantnih sistema, ona kao probabilistička teorija zahteva uvođenje nekih pojmova iz statističke fizike u svoj formalizam. Da bi se eksperimetalno odredila verovatnoća dobijanja određene vrednosti neke fizičke veličine (npr. verovatnoća nalaženja čestice u nekom delu prostora), potrebno je izvršiti dovoljno veliki broj merenja N na istom kvantnom sistemu pod istim početnim uslovima. Na taj način se ustvari određuje relativna frekvencija dobijanja tog rezultata merenja, koja u limitu $N \to \infty$ predstavlja verovatnoću njegovog dobijanja. Pogodan način da se ovakvo višestruko ponovljeno merenje izvede, ali i da se teorijski opiše, je preko statističkog ansambla. Statistički ansambl predstavlja veliki broj istovetnih fizičkih sistema. Ako su u pitanju istovetni kvantni sistemi, onda se on naziva *kvantni ansambl*. Prema tome, umesto da se statistika rezultata formira ponavljanjem merenja na istom kvantnom sistemu, što može da predstavlja poteškoću jer se u principu svakim merenjem stanje sistema menja, pogodnije je merenje izvršiti na ansamblu čime se obezbeđuju isti početni uslovi.

U prethodnim odeljcima smo videli da proces merenja u kvantnoj mehanici ima za posledicu promenu stanja kvantnog sistema, ali takođe i mernog instrumenta, što omogućava ispoljavanje određene osobine sistema, odnosno dobijanje određene vrednosti merene veličine. Dobijanje određenog rezultata merenja, prema tome, predstavlja i način kako da se taj sistem prevede u određeno kvantno stanje. Međutim, pošto u opštem slučaju rezultat merenja nije moguće predvideti, taj prelaz je slučajan događaj i jedino što se može odrediti je njegova verovatnoća. Iz tog razloga se prevođenje sistema u unapred zadato kvantno stanje obično vrši na kvantnom ansamblu. Ako od ukupnog broja N sistema koji čine ansambl kod njih N' dobijemo unapred zadati rezultat nekog merenja, i ako tih N' sistema izdvojimo i formiramo novi ansambl, onda će svaki pojedinačni kvantni sistem tog ansambla biti u istom, unapred zadatom stanju, tj. dobićemo ansambl koji se sastoji od kvantnih sistema prevedenih u željeno stanje.[17] Time je procenjena i verovatnoća dobijanja datog rezultata merenja, s obzirom da mora biti bliska relativnoj frekvenciji N'/N.

Za kvantni ansambl koji se sastoji od kvantnih sistema u istom stanju kažemo da je *homogen* ili *čist*. U tom smislu se stanje pojedinačnog kvantnog sistema koji pripada nekom čistom kvantnom ansamblu često naziva i *čisto stanje*. Čisto stanje predstavlja maksimalno moguće poznavanje osobina kvantnog sistema u datom trenutku i, kao što smo naveli, opisuje se talasnom funkcijom ili vektorom stanja.

U praksi stanje kvantnog sistema često nije potpuno određeno. Ansambl formiran od velikog broja takvih sistema će biti nehomogen. Za kvantni ansambl kažemo da je *nehomogen* ili *mešan* ako se može dobiti mešanjem (ili, ekvivalentno, ako se može razložiti na) dva ili više različitih (pod)ansambala. Pri tome se podrazumeva da se mešanjem ansambala gubi informacija o tome iz kog od prvobitnih ansambala

[17] Ovde je reč o tzv. *selektivnom merenju* gde se iz početnog ansambla izdvajaju svi kvantni sistemi na kojima je dobijen određeni unapred zadati rezultat i od njih formira novi (manji) ansambl. Ako, međutim, nakon merenja sve kvantne sisteme ostavimo u jednom ansamblu onda govorimo o *neselektivnom merenju*.

svaki pojedinačni sistem potiče. Za kvantni sistem koji pripada nekom nehomogenom ansamblu kažemo da je u *mešanom stanju*. Mešano stanje treba strogo razlikovati od superpozicije (koherentne mešavine) čistih stanja koja je opet neko čisto stanje. Kad je kvantni sistem u mešanom stanju to znači da opserver nedovoljno poznaje trenutne osobine sistema, tačnije, nije mu poznato sa kojim pojedinačnim stanjima manipuliše. Mešano stanje nije moguće opisati pomoću talasne funkcije ili vektora stanja. Videćemo da je matematički entitet koji to omogućava tzv. matrica gustine (ili statistički operator). Mešana stanja će biti razmatrana kasnije u posebnom poglavlju u okviru drugog dela ovog kursa (Kvantna mehanika 2). U nastavku ćemo se koncentrisati na analizu čistih stanja.

U ovom poglavlju smo predstavili osnovne ideje i principe kvantne mehanike analizirajući nekoliko tipičnih primera. Iz te analize smo došli do određenih opštih zaključaka ali za dublju i rigorozniju analizu će nam dalje biti potreban matematički formalizam koji omogućava precizan opis stanja kvantnog sistema i njegovih dinamičkih karakteristika. Talasne funkcije odnosno vektori stanja, kako je to anticipirano u prethodnom tekstu, formiraju tzv. prostor stanja datog kvantnog sistema koji zahvaljujući principu superpozicije ima strukturu linearnog (vektorskog) prostora. S druge strane, pokazalo se da linearni operatori koji deluju na elemente (vektore) tog prostora predstavljaju matematičke entitete koji mogu na adekvatan način da opišu fizičke veličine i transformacije u kvantnoj mehanici. U narednoj glavi je dat pregled osnovnih elemenata teorije vektorskih prostora i operatora, koja predstavlja osnovu matematičkog formalizma kvantne mehanike.

2 Matematičke osnove kvantne mehanike

2.1 Vektorski prostori

2.1.1 Algebarske strukture

Da bismo uveli pojam vektorskog prostora, definisaćemo prvo grupu i polje kao jednostavnije algebarske strukture. *Algebarska struktura* je sistem koji se sastoji od nekog skupa i jedne ili više binarnih operacija definisanih za sve elemente tog skupa. Binarna operacija povezuje uređene parove elemenata iz datog skupa sa rezultatima operacije. Ukoliko su rezultati binarne operacije takođe elementi istog skupa, tj. ako binarna operacija preslikava parove elemenata u elemente tog skupa, kažemo da je skup zatvoren u odnosu na tu operaciju.

Definicija: *Grupa* je sistem $\{G, *\}$, gde je G neprazan skup, a $*$ je binarna operacija (tzv. grupno množenje), ako:

(i) je skup G *zatvoren* u odnosu na operaciju $*$, tj.

$$a * b \in G, \quad \forall a, b \in G; \tag{2.1}$$

(ii) je operacija $*$ *asocijativna*, tj.

$$a * (b * c) = (a * b) * c, \quad \forall a, b, c \in G; \tag{2.2}$$

(iii) postoji jedinstven *neutralni* element $e \in G$ takav da je

$$a * e = e * a = a, \quad \forall a \in G; \tag{2.3}$$

(iv) $\forall a \in G$ postoji jedinstven *inverzni* element $a^{-1} \in G$ takav da je

$$a * a^{-1} = a^{-1} * a = e. \tag{2.4}$$

Definicija: Grupa je *Abelova* ako je *komutativna*, tj. ako važi

$$a * b = b * a, \quad \forall a, b \in G. \tag{2.5}$$

Primeri grupa: Skup celih brojeva $\mathbb{Z}$ predstavlja Abelovu grupu u odnosu na operaciju sabiranja brojeva. Neutralni element je broj 0, a inverzni element elementa a je broj $-a$. Analogno, skupovi racionalnih $\mathbb{Q}$, realnih $\mathbb{R}$, odnosno kompleksnih brojeva $\mathbb{C}$, takođe čine Abelove grupe u odnosu na operaciju sabiranja (odgovarajućih) brojeva. S druge strane skupovi $\mathbb{Q}$, $\mathbb{R}$ i $\mathbb{C}$ bez nule (za sva tri skupa) predstavljaju Abelove grupe u odnosu na operaciju množenja brojeva. U sva tri slučaja neutralni element je broj 1, a inverzni element elementa a je broj $1/a$.

Definicija: *Polje* je sistem $\{F, +, \cdot\}$ koji se sastoji od skupa F i dve binarne operacije, $+$ i $\cdot$ ("sabiranje" i "množenje"), takav da:

(i) sistem $\{F, +\}$ čini Abelovu grupu čiji neutralni element obeležavamo sa 0 (tzv. nulti element);

(ii) sistem $\{F\backslash\{0\}, \cdot\}$, gde $F\backslash\{0\}$ predstavlja skup F bez nultog elementa, čini Abelovu grupu čiji neutralni element obeležavamo sa 1 (tzv. jedinični element);

(iii) važi *distributivni* zakon:

$$a \cdot (b + c) = a \cdot b + a \cdot c, \quad \forall a, b, c \in F. \tag{2.6}$$

Primeri polja: Skupovi realnih i kompleksnih brojeva sa binarnim operacijama sabiranja i množenja brojeva čine polje realnih odnosno polje kompleksnih brojeva.

Definicija: Neka su F i V dva skupa takva da je $\{F, +, \cdot\}$ *polje*, a $\{V, +\}$ *Abelova grupa*. Skup V je *vektorski (ili linearni) prostor* nad poljem F, a njihove elemente zovemo *vektorima* odnosno *skalarima*, ako je definisano množenje skalara i vektora takvo da je:

(i) rezultat ponovo vektor iz V, tj.

$$\alpha x \in V, \quad \forall \alpha \in F \wedge \forall x \in V; \tag{2.7}$$

(ii) *asocijativno* u odnosu na množenje skalara, tj.

$$\alpha(\beta x) = (\alpha\beta)x, \quad \forall \alpha, \beta \in F \wedge \forall x \in V; \tag{2.8}$$

(iii) *distributivno* u odnosu na sabiranje vektora, tj.

$$\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y, \quad \forall \alpha \in F \wedge \forall x, y \in V; \tag{2.9}$$

(iv) *distributivno* u odnosu na množenje sumom skalara, tj.

$$(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x, \quad \forall \alpha, \beta \in F \wedge \forall x \in V; \tag{2.10}$$

(v) $1x = x$, $\forall x \in V$, gde je 1 neutralni element iz F u odnosu na množenje skalara.

Definicija: Ako je neki podskup W datog vektorskog prostora V takođe vektorski prostor, onda za W kažemo da je *potprostor* vektorskog prostora V.

Primeri vektorskih prostora: Skup kompleksnih n-torki $\mathbb{C}^n$ obrazuje kompleksni vektorski prostor nad poljem kompleksnih brojeva $\mathbb{C}$ (vektori su dakle oblika $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$, gde $x_1, x_2, \ldots, x_n \in \mathbb{C}$) ako je sabiranje i množenje vektora skalarima definisano kao $x+y = (x_1+y_1, x_2+y_2, \ldots, x_n+y_n)$ i $\alpha x = (\alpha x_1, \alpha x_2, \ldots, \alpha x_n)$, $\forall \alpha \in \mathbb{C}$ i $\forall x, y \in \mathbb{C}^n$. Specijalni slučaj je vektorski prostor $\mathbb{R}^n$ nad poljem $\mathbb{R}$, odnosno skup "običnih" trodimenzionih vektora $\mathbb{R}^3$ nad poljem $\mathbb{R}$.

2.1.2 Linearna zavisnost vektora i bazis vektorskog prostora

Definicija: Ako su x_i vektori prostora V, a α_i skalari polja F, onda se vektor

$$y = \sum_{i=1} \alpha_i x_i \tag{2.11}$$

naziva *linearna kombinacija vektora* x_i sa koeficijentima α_i.

Definicija: Skup vektora $\{x_i | i = 1, 2, ..., n\}$ nekog prostora V nad poljem F je *linearno nezavisan* ako je jednakost

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i x_i = 0 \quad \text{(nulti vektor)} \tag{2.12}$$

ispunjena jedino u slučaju $\alpha_i = 0$, $i = 1, 2, ..., n$. U suprotnom (tj. kad je bar jedan koeficijent $\alpha_i \neq 0$) taj skup vektora je *linearno zavisan*.

Neka je bar jedan koeficijent različit od nule, npr. $\alpha_1 \neq 0$. Tada se može napisati

$$x_1 = -\frac{\alpha_2}{\alpha_1} x_2 - \frac{\alpha_3}{\alpha_1} x_3 - \cdots - \frac{\alpha_n}{\alpha_1} x_n, \tag{2.13}$$

tj. x_1 je linearna kombinacija ostalih vektora. Dakle, ako su vektori *linearno zavisni* sledi da je bar jedan od njih linearna kombinacija svih ostalih.

Definicija: Maksimalan broj linearno nezavisnih vektora u nekom vektorskom prostoru se naziva *dimenzija* prostora. Ako je prostor V n-dimenzion, obeležavaćemo ga sa V_n.

Lako se pokazuje da je dimenzija pravog potprostora prostora V_n manja od n.

Definicija: *Potpun* skup vektora u nekom prostoru je takav skup preko kojeg se može izraziti (kao linearna kombinacija) bilo koji vektor iz tog prostora. Kažemo da takav skup *obrazuje* ovaj prostor.

Definicija: Svaki linerno nezavisan i potpun skup vektora iz nekog vektorskog prostora se naziva *bazis* (ili baza) u tom prostoru.[1]

Teorema: Svaki skup od n linearno nezavisnih vektora u n-dimenzionom prostoru čini bazis u tom prostoru.

[1] Postoji alternativna definicija preko tzv. lineala nad skupom vektora (v. reference II.B.2 i II.B.6 u bibliografiji).

Dokaz: Neka je $\{x_i \,|\, i = 1, \ldots, n\}$ skup linearno nezavisnih vektora u prostoru V_n. Dodajmo tom skupu proizvoljni vektor $y \in V_n$. Pošto je u n-dimenzionom prostoru maksimalan broj linearno nezavisnih vektora jednak n, a novi skup sadrži $n + 1$ vektor, ovi vektori su linearno zavisni, tj. uslov

$$a_0 y + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \ldots + a_n x_n = 0, \quad a_0 \neq 0 \tag{2.14}$$

može da važi samo ako je bar jedan od koeficijenata a_i $(i = 1, \ldots, n)$ različit od nule. Tada je

$$y = -\frac{a_1}{a_0} x_1 - \frac{a_2}{a_0} x_2 + \ldots - \frac{a_n}{a_0} x_n, \quad \forall y \in V_n, \tag{2.15}$$

tj. proizvoljni vektor iz prostora V_n se može predstaviti kao linearna kombinacija vektora x_i. Prema tome, skup $\{x_i \,|\, i = 1, \ldots, n\}$ je potpun, a pošto je i linearno nezavisan on je bazis u V_n.

U ovoj glavi ćemo vektore bazisa obično obeležavati sa e_i ili x_i $(i = 1, 2, \ldots)$. Ako je $\{e_1, e_2, \ldots, e_n\}$ bazis u nekom n-dimenzionom vektorskom prostoru onda za bilo koji vektor x iz tog prostora postoji razvoj

$$x = \sum_{i=1}^{n} \xi_i \, e_i. \tag{2.16}$$

Koeficijenti ξ_i se nazivaju *koordinate* ili *komponente* vektora x u datom bazisu.

2.1.3 Jednoznačnost predstavljanja vektora u bazisu. Izomorfizam prostora

Teorema: Svaki vektor iz prostora V se *jednoznačno* izražava kao linearna kombinacija vektora nekog izabranog bazisa u V.

Dokaz: Neka je $\{e_1, e_2, \ldots, e_n\}$ bazis u prostoru V. Pretpostavimo suprotno, tj. da se proizvoljni vektor $x \in V$ može razviti u istom bazisu preko dva skupa različitih komponenata

$$x = \sum_{i=1}^{n} \xi_i \, e_i \quad \wedge \quad x = \sum_{i=1}^{n} \eta_i \, e_i. \tag{2.17}$$

Oduzimanjem ovih izraza sledi

$$0 = \sum_{i=1}^{n} \xi_i \, e_i - \sum_{i=1}^{n} \eta_i \, e_i = \sum_{i=1}^{n} (\xi_i - \eta_i) \, e_i. \tag{2.18}$$

Pošto su vektori bazisa $\{e_1, e_2, \ldots, e_n\}$ linearno nezavisni sledi

$$\xi_i - \eta_i = 0, \tag{2.19}$$

tj. $\xi_i = \eta_i$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$.

Drugim rečima, u datom bazisu svaki vektor se *jednoznačno* predstavlja (reprezentuje) skupom koeficijenata razvoja (komponenti vektora ili koordinata)

$$x = \sum_{i=1}^{n} \xi_i \, x_i \quad \longleftrightarrow \quad (\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n). \tag{2.20}$$

Umesto uređenih n-torki $(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n)$, od koeficijenata razvoja možemo formirati matrice kolone, tj.

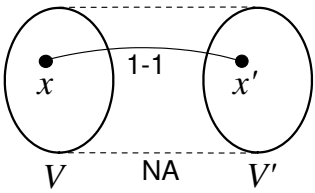
$$x = \sum_{i=1}^{n} \xi_i \, x_i \quad \longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{pmatrix}. \tag{2.21}$$

Pokazaćemo da skup matrica kolona (ili matrica vrsta) formiranih od komponenti vektora pri razvoju u datom bazisu čini vektorski prostor sa istom algebarskom strukturom kao prostor originalnih vektora.

Definicija: Dva vektorska prostora V i V' nad istim poljem F su *izomorfni* ako postoji bijekcija f (1-1 i NA preslikavanje) između ta dva prostora (tj. ako $\forall x \in V$ postoji jedno $x' = f(x) \in V'$ i obrnuto), tako da je

$$f(\alpha x + \beta y) = \alpha f(x) + \beta f(y), \quad \forall x, y \in V, \ \forall \alpha, \beta \in F, \tag{2.22}$$

tj. da se vektor $x + y$ preslikava u vektor $x' + y'$, a vektor αx u $\alpha x'$.



Slika 2.1. Bijekcija (1-1 i NA preslikavanje) prostora V i V'.

Dakle, izomorfizam vektorskih prostora je bijekcija koja linearnu kombinaciju vektora prevodi u istu takvu linearnu kombinaciju likova.

Teorema: Svaki n-dimenzioni vektorski prostor V_n nad poljem F je *izomorfan* sa prostorom n-komponentnih matrica kolona F^n.

Dokaz: Neka je $\{e_1, e_2, \ldots, e_n\}$ bazis u prostoru V_n. Tada se svaki vektor $x \in V_n$ može napisati kao

$$x = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \, e_i. \tag{2.23}$$

Prema prethodnoj teoremi, skup $\{\alpha_1, \ldots, \alpha_n\}$ je za vektor x jednoznačan u datom bazisu pa je uspostavljena bijekcija između V_n i F^n

$$x \leftrightarrow f(x) = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}. \tag{2.24}$$

Tada je $\forall \alpha, \beta \in F$ i $\forall x, y \in V_n$

$$f(\alpha x + \beta y) = \begin{pmatrix} \alpha\alpha_1 + \beta\beta_1 \\ \alpha\alpha_2 + \beta\beta_2 \\ \vdots \\ \alpha\alpha_n + \beta\beta_n \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix} = \alpha f(x) + \beta f(y), \tag{2.25}$$

tj. proizvoljna linearna kombinacija vektora x i y se preslikava u istu takvu linearnu kombinaciju likova (matrica kolona).

2.1.4 Skalarni proizvod i ortogonalnost. Unitarni i Hilbertovi prostori

Definicija: *Skalarni proizvod* u kompleksnom vektorskom prostoru V ($\leftrightarrow \mathbb{C}^n$) je preslikavanje koje svakom uređenom paru vektora $x, y \in V$ pridružuje skalar $(x, y) \in \mathbb{C}$ (polje kompleksnih brojeva) i ima sledeće osobine:

(i) *ermitsku simetriju*, tj.

$$(x, y) = (y, x)^*, \quad \forall x, y \in V; \tag{2.26}$$

(ii) *linearnost po drugom članu*, tj.

$$(x, \alpha y + \beta z) = \alpha(x, y) + \beta(x, z), \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C} \wedge \forall x, y, z \in V \tag{2.27}$$

(iii) osobinu *stroge pozitivnosti*, tj.

$$(x, x) \geq 0, \quad \forall x \in V, \tag{2.28}$$

pri čemu je

$$(x, x) = 0 \text{ ako i samo ako } x = 0. \tag{2.29}$$

Često se umesto osobine (ii) definiše antilinearnost po prvom članu

$$(\alpha x + \beta y, z) = \alpha^*(x, z) + \beta^*(y, z). \tag{2.30}$$

Ova osobina sledi iz osobina (i) i (ii) u definiciji skalarnog proizvoda

$$(\alpha x + \beta y, z) = (z, \alpha x + \beta y)^* = [\alpha(z, x) + \beta(z, y)]^* = \alpha^*(x, z) + \beta^*(y, z). \tag{2.31}$$

Vektorski prostori sa definisanim skalarnim proizvodom se obično nazivaju *ermitski prostori*. Realni konačnodimenzioni ermitski prostori se nazivaju *euklidski prostori*, dok se kompleksni konačnodimenzioni ermitski prostori zovu *unitarni prostori*.

Beskonačnodimenzioni, kompletni i separabilni ermitski prostori se nazivaju *Hilbertovi prostori*. Prostor je separabilan ako u njemu postoji konačan ili beskonačan ali prebrojiv svuda gust skup. Ako prostor ima osobinu da je u njemu svaki Košijev niz konvergentan onda ga zovemo kompletnim.[2] Pokazuje se da su konačnodimenzioni ermitski prostori uvek i separabilni i kompletni.

Zahvaljujući skalarnom proizvodu, vektorima iz ermitskih prostora se može pridružiti norma i uvesti pojam ortogonalnosti. *Norma* vektora x se definiše kao

$$\|x\| = (x, x)^{1/2}. \tag{2.32}$$

Na osnovu osobine stroge pozitivnosti skalarnog proizvoda $\|x\|$ je uvek realan broj. Ako je $\|x\| = 1$, kažemo da je vektor x *normiran* (na jedinicu). Dva vektora x i y iz istog prostora se nazivaju *ortogonalnim* ako je $(x, y) = 0$. Za skup vektora $\{x_1, \ldots, x_n\}$ je kaže da je *ortonormiran* ako je

$$(x_i, x_j) = \delta_{ij}, \quad \forall i, j = 1, \ldots, n, \tag{2.33}$$

pri čemu je tzv. Kronekerov simbol definisan uslovom

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 \text{ za } i = j \\ 0 \text{ za } i \neq j \end{cases}. \tag{2.34}$$

Teorema: Svaki *ortonormirani* skup vektora je *linearno nezavisan*.

Dokaz: Neka je skup vektora $\{x_1, \ldots, x_n\}$ ortonormiran. Formirajmo sumu $\sum_{i=1}^{n} \alpha_i x_i$ i ispitajmo za koje vrednosti α_i je ova suma jednaka nultom vektoru, tj. $\sum_{i=1}^{n} \alpha_i x_i = 0$. Ako pomnožimo ovu jednakost sa proizvoljnim vektorom iz datog skupa, sledi

$$0 = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i (x_i, x_j) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \delta_{ij} = \alpha_j, \quad j = 1, \ldots, n. \tag{2.35}$$

Pošto su svi koeficijenti $\alpha_j = 0$, proizilazi da je skup $\{x_1, \ldots, x_n\}$ linearno nezavisan.

Očigledno, ortonormirani skup vektora koji je kompletan, tj. koji obrazuje vektorski prostor, je bazis u tom prostoru. Takav bazis se naziva *ortonormirani bazis*. Primer takvog bazisa u trodimenzionom euklidskom prostoru je skup od tri jedinična vektora (orta) $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$ (alternativne oznake su $\{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}\}$) koji su usmereni duž osa x, y, z Dekartovog (pravouglog) koordinatnog sistema.

[2] Više o pojmovima kompletnosti i separabilnosti prostora može se naći npr. u knjizi "Matematičke osnove teorijske fizike" od Đ. Mušickog i B. Milića, bib. ref. II.B.6.

Komponente vektora u ortonormiranom bazisu $\{e_1, \ldots, e_n\}$, tzv. Furijeovi koeficijenti, se jednostavno određuju množeći skalarno dati vektor sa odgovarajućim vektorima bazisa

$$(e_j, x) = \left(e_j, \sum_{i=1}^{n} \xi_i\, e_i\right) = \sum_{i=1}^{n} \xi_i\, (e_j, e_i) = \sum_{i=1}^{n} \xi_i\, \delta_{ij} = \xi_j, \tag{2.36}$$

dakle ako je $x = \sum_{i=1}^{n} \xi_i\, e_i$, onda su $\xi_i = (e_i, x)$. Takođe se skalarni proizvod vektora jednostavno računa preko njihovih komponenti u ortonormiranom bazisu. Ako su $x = \sum_{i=1}^{n} \xi_i\, e_i$ i $y = \sum_{i=1}^{n} \eta_i\, e_i$, onda je

$$(x, y) = \left(\sum_i \xi_i\, e_i, \sum_j \eta_j\, e_j\right) = \sum_i \sum_j \xi_i^*\eta_j\, (e_i, e_j) = \sum_i \sum_j \xi_i^*\eta_j\, \delta_{ij} = \sum_i \xi_i^*\eta_i. \tag{2.37}$$

U specijalnom slučaju kada je $x = y$ dobija se izraz za kvadrat norme vektora $(x, x) = \|x\|^2 = \sum_i |\xi_i|^2 > 0$.

Napomenimo da se od nekog proizvoljnog bazisa u unitarnom prostoru uvek može konstruisati ortonormirani bazis u tom prostoru koristeći Gram-Šmitov (J. P. Gram, E. Schmidt) postupak ortonormalizacije[3]

2.1.5 Prostor stanja kvantnog sistema

Za kvantnu mehaniku su od posebnog značaja Hilbertovi prostori pošto se stanja kvantnih sistema predstavljaju normiranim vektorima iz tih prostora. Ove vektore tada nazivamo *vektorima stanja* datog kvantnog sistema, a Hilbertov prostor kome oni pripadaju *prostorom stanja* tog sistema. Svaki prostor stanja je prema tome linearan, a posledica toga je važenje fundamentalnog principa za kvantnu mehaniku – principa superpozicije. Takođe, uslov da vektori budu normirani na jedinicu je od suštinskog značaja jer omogućava korektno izračunavanje verovatnoće. Ovaj uslov je obezbeđen činjenicom da vektori koji pripadaju nekom Hilbertovom prostoru imaju *konačnu normu* (iako je sam prostor beskonačnodimenzion). Još jedna važna osobina Hilbertovih prostora je da uvek sadrže prebrojiv ortonormirani bazis (sledi iz osobine separabilnosti).

Posebna realizacija Hilbertovih prostora su tzv. *funkcionalni Hilbertovi (ili Lebegovi) prostori* $\mathcal{L}^2$. Takav prostor čine kompleksne funkcije f realnih promenljivih $\xi \equiv \{\xi_1, \xi_2, \ldots\}$ koje su po modulu kvadratno integrabilne, tj. za koje važi

$$\int |f(\xi)|^2 \mathrm{d}\xi < +\infty, \tag{2.38}$$

gde je $\mathrm{d}\xi$ element prostora nezavisno promenljivih (domena) funkcije f. Skalarni proizvod funkcija $f_1, f_2 \in \mathcal{L}^2$ je definisan kao

$$(f_1, f_2) = \int f_1^*(\xi) f_2(\xi)\, \mathrm{d}\xi. \tag{2.39}$$

[3] Gram-Šmitov postupak je predstavljen u referencama II.B.2, II.B.4, II.B.6, II.B.8 navedenim u bibliografiji.

Kvadrat norme funkcije $f(\xi)$ je dakle $\|f\|^2 = \int |f(\xi)|^2 \, \mathrm{d}\xi$, a uslov kvadratne integrabilnosti znači da elementi funkcionalnog Hilbertovog prostora imaju konačnu normu.

Kada elemente funkcionalnog Hilbertovog prostora koristimo za opis stanja kvantnog sistema, nazivamo ih *talasnim funkcijama*. Strogo govoreći, prostor stanja je nešto uži skup od $\mathcal{L}^2$. On je ustvari potprostor od $\mathcal{L}^2$ čiji su elementi kvadratno integrabile funkcije koje, osim toga, moraju biti i dovoljno regularne. Ovo poslednje podrazumeva da su svuda definisane, jednoznačne, neprekidne i diferencijabilne (osim, što se poslednje osobine tiče, u tačkama gde je potencijal singularan).

2.2 Linearni operatori

2.2.1 Definicija operatora i osnovne operacije sa njima

Definicija: Preslikavanje $\hat{A}$ koje svim vektorima iz nekog vektorskog prostora U nad poljem F pridružuje vektore iz istog ili nekog drugog vektorskog prostora V (prostor likova) nad istim poljem F naziva se *operator*. Pisaćemo

$$\hat{A}x = y, \quad y \in V, \ \forall x \in U. \tag{2.40}$$

Ako je $U = V$, $\hat{A}$ je operator na datom vektorskom prostoru.

Definicija: *Linearni operator* prevodi linearnu kombinaciju vektora iz vektorskog prostora U u istu takvu linearnu kombinaciju vektora iz prostora likova V, tj.

$$\hat{A}(\alpha x + \beta y) = \alpha \hat{A}x + \beta \hat{A}y, \quad \forall x, y \in U, \ \forall \alpha, \beta \in F. \tag{2.41}$$

Operacije sa operatorima su definisane preko delovanja operatora na vektore:

- *Sabiranje operatora*: Zbir operatora $\hat{A} + \hat{B} = \hat{C}$ znači da je $\hat{C}x = (\hat{A} + \hat{B})x = \hat{A}x + \hat{B}x$, $\forall x \in U$ (U je presek domena operatora $\hat{A}$ i $\hat{B}$);
- *Množenje operatora skalarom*: Proizvod skalara i operatora $\alpha\hat{A} = \hat{B}$ znači da je $\hat{B}x = (\alpha\hat{A})x = \alpha(\hat{A}x)$, $\forall x \in U$ (na osnovu definicije linearnog operatora);
- *Množenje operatora*: Proizvod operatora $\hat{A}\hat{B} = \hat{C}$ znači da je $\hat{C}x = (\hat{A}\hat{B})x = \hat{A}(\hat{B}x)$, $\forall x \in U$ (U je domen operatora $\hat{B}$, a operator $\hat{A}$ deluje u prostoru likova od $\hat{B}$). Prema tome, proizvod operatora znači njihovo uzastopno delovanje.

Množenje linearnih operatora je asocijativno, tj. $(\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = \hat{A}\hat{B}\hat{C}$, i distributivno u odnosu na sabiranje, tj.

$$(\hat{A} + \hat{B})\hat{C} = \hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{C}, \quad \hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) = \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}, \tag{2.42}$$

ali u opštem slučaju *nije komutativno*, tj. $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ odnosno $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, gde je

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{2.43}$$

komutator operatora $\hat{A}$ i $\hat{B}$.

2.2.2 Predstavljanje operatora matricama

Pokazali smo da se izborom nekog bazisa $\{e_1, e_2, ..., e_n\}$ u vektorskom prostoru V nad poljem F uspostavlja izomorfizam tog prostora sa prostorom matrica kolona F^n, čime je omogućeno reprezentovanje vektora iz V matricama kolonama iz F^n. Isti izomorfizam omogućava predstavljanje (reprezentovanje) linearnih operatora koji deluju u prostoru V, a koji je i njihov prostor likova, kvadratnim $n \times n$ matricama koje deluju u prostoru F^n.

Neka su $x = \sum_i \xi_i e_i$ i $y = \sum_i \eta_i e_i$ dva vektora iz V i neka linearni operator $\hat{A}$ preslikava x u y, tj. $\hat{A}x = y$. Pošto se vektori reprezentuju matricama kolonama iz F^n, tj.

$$x \to \mathsf{x} = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{pmatrix}, \quad y \to \mathsf{y} = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \vdots \\ \eta_n \end{pmatrix}, \tag{2.44}$$

proizilazi da postoji $n \times n$ matrica A takva da je $\mathsf{Ax} = \mathsf{y}$. Prema tome, u datom bazisu operator $\hat{A}$ se reprezentuje kvadratnom matricom A.

Ako je bazis $\{e_1, e_2, ..., e_n\}$ *ortonormiran*, onda su komponente vektora y

$$\eta_i = (e_i, y) = (e_i, \hat{A}x) = \left(e_i, \hat{A}\sum_j \xi_j e_j\right) = \left(e_i, \sum_j \xi_j \hat{A} e_j\right) = \sum_j \xi_j (e_i, \hat{A} e_j), \tag{2.45}$$

tj. možemo pisati

$$\eta_i = \sum_{j=1}^{n} A_{ij}\, \xi_j, \quad A_{ij} = (e_i, \hat{A} e_j). \tag{2.46}$$

Izraz na levoj strani predstavlja pravilo množenja matrice A, čiji su elementi A_{ij} dati na desnoj strani, sa matricom kolonom x dajući matricu kolonu y, tj.

$$\mathsf{y} = \mathsf{Ax}, \quad \mathsf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}. \tag{2.47}$$

Teorema: Ako operatore $\hat{A}$ i $\hat{B}$ reprezentujemo matricama A i B onda se proizvod operatora $\hat{A}\hat{B}$ preslikava u proizvod matrica AB, tj. množenje operatora se svodi na množenje matrica.

Dokaz: Naka je $\hat{A}\hat{B} = \hat{C}$ i $y = \hat{C}x = \hat{A}\hat{B}x$. Ako uvedemo vektor $z = \hat{B}x$, onda je $y = \hat{A}z$. Izrazimo vektore x, y, z preko njihovih komponenti u nekom bazisu $\{e_1, e_2, ..., e_n\}$:

$$x = \sum_{i=1}^{n} \xi_i e_i, \quad y = \sum_{i=1}^{n} \eta_i e_i, \quad z = \sum_{i=1}^{n} \zeta_i e_i. \tag{2.48}$$

Tada iz $y = \hat{C}x$, $z = \hat{B}x$ i $y = \hat{A}z$, koristeći pravila reprezentovanja, sledi

$$\eta_i = \sum_j C_{ij}\,\xi_j, \quad \zeta_i = \sum_j B_{ij}\,\xi_j, \quad \eta_i = \sum_j A_{ij}\,\zeta_j. \tag{2.49}$$

Veza između η_i i ξ_i komponenti je data prvom relacijom, a takođe se dobija iz druge i treće relacije eliminacijom ζ_i komponenti

$$\eta_i = \sum_j A_{ij} \sum_k B_{jk}\,\xi_k = \sum_j \sum_k A_{ij}\,B_{jk}\,\xi_k = \sum_k \left(\sum_j A_{ij}\,B_{jk} \right) \xi_k. \tag{2.50}$$

Poredeći ove dve veze sledi $C_{ik} = \sum_j A_{ij}\,B_{jk}$, tj. $\mathsf{C} = \mathsf{AB}$.

2.2.3 Osnovne vrste operatora i njihove osobine

Definicija: *Jedinični operator* $\hat{I}$ preslikava svaki vektor iz vektorskog prostora V u isti taj vektor, tj.

$$\hat{I}x = x, \quad \forall x \in V. \tag{2.51}$$

Definicija: *Inverzni operator* $\hat{A}^{-1}$ operatora $\hat{A}$ je takav da njihov proizvod daje jedinični operator $\hat{I}$, tj.

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{I}. \tag{2.52}$$

Inverzni operator $\hat{A}^{-1}$ postoji samo ako je operator $\hat{A}$ *nesingularan* (ili regularan, tj. ako je $\det \hat{A} \neq 0$).

U unitarnim i Hilbertovim prostorima, zahvaljujući definisanom skalarnom proizvodu, svakom linearnim operatoru se može pridružiti tzv. adjungovani operator.

Definicija: *Adjungovani operator* $\hat{A}^+$ operatora $\hat{A}$, koji deluje u nekom unitarnom ili Hilbertovom prostoru V, je definisan relacijom

$$(\hat{A}x, y) = (x, \hat{A}^+ y), \quad \forall x, y \in V. \tag{2.53}$$

Nije teško pokazati da operacija adjungovanja ima sledeće osobine:

$$(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}, \tag{2.54}$$

$$(\alpha\hat{A})^+ = \alpha^*\hat{A}^+, \tag{2.55}$$

$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+, \tag{2.56}$$

$$(\hat{A} + \hat{B})^+ = \hat{A}^+ + \hat{B}^+. \tag{2.57}$$

Teorema: Ako se operator $\hat{A}$ u nekom ortonormiranom bazisu reprezentuje matricom A, onda se operator $\hat{A}^+$ reprezentuje matricom koja je transponovana i kompleksno konjugovana u odnosu na matricu A i naziva se adjungovanom matricom:

$$\hat{A} \to \mathsf{A} \quad \Rightarrow \quad \hat{A}^+ \to \mathsf{A}^+ \equiv \tilde{\mathsf{A}}^*. \tag{2.58}$$

Dokaz: Neka je u ortonormiranom bazisu $\{e_1, e_2, ..., e_n\}$ operator $\hat{A}$ reprezentovan matricom A, a operator $\hat{A}^+$ matricom B. Tada su matrični elementi poslednje matrice

$$B_{ij} = (e_i, \hat{A}^+ e_j) = ((\hat{A}^+)^+ e_i, e_j) = (\hat{A} e_i, e_j) = (e_j, \hat{A} e_i)^* = A^*_{ji}. \tag{2.59}$$

Prema tome $\mathsf{B} \equiv \mathsf{A}^+ = \tilde{\mathsf{A}}^*$.

Definicija: Linearni operator $\hat{A}$ koji je jednak svom adjungovanom operatoru

$$\hat{A}^+ = \hat{A}, \tag{2.60}$$

naziva se *ermitski* (ili autoadjungovani) operator.

Na osnovu definicije adjungovanog operatora sledi da za ermitski operator $\hat{A}$ važi

$$(\hat{A}x, y) = (x, \hat{A}y), \quad \forall x, y \in V. \tag{2.61}$$

Definicija: Ermitski operator $\hat{P}$ koji ima osobinu da je

$$\hat{P}^2 = \hat{P} \tag{2.62}$$

(osobina idempotentnosti) naziva se *projektor*.

Pokazuje se da projektori koji deluju u nekom vektorskom prostoru V preslikavaju taj prostor na neki njegov potprostor. U tom smislu se projektor na potprostor $W \subset V$ označava sa $\hat{P}_W$. Pri tome, projektor $\hat{P}_W$ na vektore iz potprostora W deluje kao jedinični operator, tj. $\hat{P}_W x = x, \forall x \in W$.

Definicija: *Unitarni* operator $\hat{U}$ je definisan relacijom

$$(\hat{U}x, \hat{U}y) = (x, y), \quad \forall x, y \in V, \tag{2.63}$$

gde je V unitarni ili Hilbertov prostor.

Unitarni operatori su uvek nesingularni, tako da svaki unitarni operator ima svoj inverzni operator. Tada iz definicije $(x, x) = (\hat{U}x, \hat{U}x) = (x, \hat{U}^+\hat{U}x)$ sledi

$$\hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^+ = \hat{I}, \tag{2.64}$$

odnosno

$$\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}. \tag{2.65}$$

Koristeći definiciju norme imamo

$$\|\hat{U}x\| \equiv (\hat{U}x, \hat{U}x)^{1/2} = (x, x)^{1/2} = \|x\|. \tag{2.66}$$

Unitarni operatori, dakle, *ne menjaju* normu vektora. Analogno se pokazuje da oni takođe ne menjaju ni "ugao" među vektorima (tj. da je $(\hat{U}x, \hat{U}y) = (x, y)$).

Osobine (2.64)-(2.66) imaju operatori (matrice) linearnih transformacija u trodimenzionom Euklidskom prostoru kojima se vrši prelazak sa jednog koordinatnog sistema na drugi. Prema tome, pomenute transformacije su unitarne. Unitarni operatori u unitarnim i Hilbertovim prostorima se analogno koriste za prelazak sa jednog ortonormiranog bazisa na drugi.

2.2.4 Svojstveni problem operatora

Definicija: Nenulti vektor $x \in V$ za koji važi

$$\hat{A}x = ax \tag{2.67}$$

naziva se *svojstveni vektor* linearnog operatora $\hat{A}$, a broj a je odgovarajuća *svojstvena vrednost*. Nalaženje svojstvenih vektora i svojstvenih vrednosti nekog operatora naziva se *svojstveni problem* tog operatora.

Definicija: *Spektar* operatora je skup svih njegovih različitih svojstvenih vrednosti. Ako je ovaj skup *konačan* ili *prebrojiv* kažemo da je spektar *diskretan*, a ako je on *neprebrojiv* kažemo da je spektar *neprekidan (kontinualan)*.

Ako je x svojstveni vektor linearnog operatora $\hat{A}$ koji odgovara svojstvenoj vrednosti a, i ako je α ma kakav skalar, onda je

$$\hat{A}(\alpha x) = \alpha \hat{A}x = \alpha a x = a(\alpha x), \tag{2.68}$$

tj. αx je takođe svojstveni vektor tog operatora koji odgovara istoj svojstvenoj vrednosti a. Prema tome, jednoj svojstvenoj vrednosti kojoj odgovara svojstveni vektor x uvek odgovara i ceo *pravac* (jednodimenzioni prostor) koji obrazuju vektori αx. Zbog ove nejednoznačnosti obično se kao reprezenti biraju svojstveni vektori jedinične norme. Navedimo ovde da normiranje svojstvenih vektora koji odgovaraju svojstvenim vrednostima neprekidnog spektra nije moguće (v. poglavlje 2.2.6).

Ukoliko je polje skalara skup kompleksnih brojeva onda se ni nakon normiranja svojstvenih vektora ne eliminiše pomenuta nejednoznačnost – svojstveni vektor može biti određen do na *fazni faktor.* Da bismo ovo pokazali posmatrajmo dva normirana svojstvena vektora, x i x', operatora $\hat{A}$ koji odgovaraju istoj svojstvenoj vrednosti a i pripadaju istom pravcu, tj. $x' = \alpha x$. Tada je

$$\|x'\| = \|\alpha x\| = (\alpha x, \alpha x)^{1/2} = (\alpha^* \alpha)^{1/2} (x, x)^{1/2} = |\alpha| \, \|x\| = |\alpha|. \tag{2.69}$$

Pošto je s druge strane $\|x'\| = 1$, sledi da je $|\alpha| = 1$, tj. α je proizvoljan *kompleksan broj na jediničnom krugu*: $\alpha = e^{i\varphi}$ (φ je faza kompleksnog broja).

Definicija: Ako jednoj svojstvenoj vrednosti odgovara više linearno nezavisnih svojstvenih vektora kažemo da je ta svojstvena vrednost *degenerisana*. Ukupan broj linearno nezavisnih svojstvenih vektora koji odgovaraju istoj svojstvenoj vrednosti se naziva *stepen degeneracije* ili *multiplicitet* te svojstvene vrednosti. Ako je multiplicitet svojstvene vrednosti jednak jedinici onda je ona *nedegenerisana*.

Neka je a neka n-tostruko degenerisana svojstvena vrednost i neka su x_1, x_2, ..., x_n linearno nezavisni svojstveni vektori (jedinične norme) koji joj odgovaraju. Tada je i proizvoljna linearna kombinacija $y = \sum_i \alpha_i x_i$ takođe svojstveni vektor koji odgovara svojstvenoj vrednosti a, tj.

$$\hat{A}y = \hat{A}\sum_i \alpha_i x_i = \sum_i \alpha_i \hat{A}x_i = \sum_i \alpha_i a x_i = a\sum_i \alpha_i x_i = ay. \tag{2.70}$$

U konačnodimenzionim prostorima rešavanje svojstvenog problema se svodi na rešavanje tzv. karakteristične jednačine. Izborom nekog bazisa u V_n svojstveni problem operatora $\hat{A}$ se reprezentuje matričnom jednačinom

$$\hat{A}x = ax \;\leftrightarrow\; \mathsf{A}\mathsf{x} = a\mathsf{x} \;\Leftrightarrow\; (\mathsf{A} - a\mathsf{I})\mathsf{x} = 0, \tag{2.71}$$

gde je I jedinična $n\times n$ matrica. Netrivijalno rešenje x poslednje (homogene) jednačine postoji samo ako je

$$\det(\mathsf{A} - a\mathsf{I}) = 0. \tag{2.72}$$

Razvijanjem determinante $\det(\mathsf{A} - a\mathsf{I})$ dobija se tzv. *karakteristični polinom* (n-tog reda), a navedeni uslov se svodi na algebarsku jednačinu n-tog reda sa nepoznatom a, tj. na *karakterističnu jednačinu*.

Pošto karakteristična jednačina ima *bar jedno rešenje* (osnovni stav algebre), a *najviše n različitih rešenja* u polju kompleksnih brojeva, sledi da linearni operator koji deluje u n-dimenzionom unitarnom prostoru ima najviše n različitih svojstvenih vrednosti, tj. ima čisto *diskretan* spektar. Odavde proizilazi da neprekidan spektar mogu da imaju samo operatori koji deluju u beskonačnodimenzionim prostorima.

Napomenimo da se svojstveni problem operatora koji deluju u beskonačnodimenzionim (npr. Hilbertovim) prostorima ne može rešiti prelaskom na matričnu reprezentaciju, jer ne postoji način da se razvije beskonačna determinanta u (2.72). Svojstveni problem se ovde rešava na drugačiji način.

2.2.5 Svojstveni problem ermitskog operatora. Svojstveni bazis. Opservable

Teorema: Svojstvene vrednosti ermitskog operatora su *realne*.

Dokaz: Neka je $\hat{A}$ ermitski operator i neka su x i a jedan svojstveni vektor i odgovarajuća svojstvena vrednost ovog operatora, tj. $\hat{A}x = ax$. Tada je

$$(x, \hat{A}x) = (x, ax) = a(x, x). \tag{2.73}$$

S druge strane za ermitski operator važi

$$(x, \hat{A}x) = (\hat{A}^+x, x) = (\hat{A}x, x) = (ax, x) = a^*(x, x), \tag{2.74}$$

odakle sledi $a^* = a$.

Za kvantnu mehaniku je ovo važna osobina jer su rezultati merenja neke fizičke veličine zapravo svojstvene vrednosti odgovarajućeg oparatora. Pošto je rezultat merenja uvek neki realan broj, sledi da se *fizičkim veličinama pridružuju ermitski operatori*.

Teorema: Svojstveni vektori koji odgovaraju *različitim* svojstvenim vrednostima (disktretnog spektra) ermitskog operatora su *uzajamno ortogonalni*.

Dokaz: Neka su x_1 i x_2 dva svojstvena vektora operatora $\hat{A}$, a a_1 i a_2 svojstvene vrednosti koje im odgovaraju, tj. $\hat{A}x_1 = a_1x_1$ i $\hat{A}x_2 = a_2x_2$. Tada je

$$(x_1, \hat{A}x_2) = (x_1, a_2x_2) = a_2(x_1, x_2). \tag{2.75}$$

S druge strane je

$$\begin{aligned}(x_1, \hat{A}x_2) &= (\hat{A}^+x_1, x_2) = (\hat{A}x_1, x_2) = (x_2, \hat{A}x_1)^* \\ &= (x_2, a_1x_1)^* = a_1^*(x_2, x_1)^* = a_1(x_1, x_2).\end{aligned} \tag{2.76}$$

Oduzimanjem ova dva izraza sledi

$$(a_1 - a_2)(x_1, x_2) = 0. \tag{2.77}$$

Ako je $a_1 \neq a_2$ sledi $(x_1, x_2) = 0$, tj. x_1 i x_2 su ortogonalni vektori.

U n-dimenzionom unitarnom prostoru svaki ermitski operator ima n *svojstvenih vrednosti* koje se dobijaju kao rešenja karakteristične jednačine. Videli smo da za ermitske operatore sve ove vrednosti moraju biti *realne*, a svojstveni vektori koji odgovaraju različitim svojstvenim vrednostima su *uzajamno ortogonalni*. Ako je za dati ermitski operator neka svojstvena vrednost degenerisana, tj. odgovara joj nekoliko linearno nezavisnih svojstvenih vektora, oni se uvek mogu zameniti skupom koji se sastoji od istog broja ortogonalnih vektora (ranije pomenuti Gram-Šmitov postupak ortonormalizacije).

Posledica: *Ermitskom operatoru koji deluje u n-dimenzionom unitarnom prostoru se može pridružiti tačno n uzajamno ortogonalnih (i normiranih) svojstvenih vektora.* Pošto je ovaj skup vektora linearno nezavisan i potpun on čini tzv. *svojstveni bazis* ermitskog operatora u odgovarajućem unitarnom prostoru.

Teorema: Ermitski operator se u svom svojstvenom bazisu reprezentuje *dijagonalnom* matricom.

Dokaz: Neka je $\{e_1, e_2, ...\}$ svojstveni bazis ermitskog operatora $\hat{A}$ i neka je $\{a_1, a_2, ...\}$ skup odgovarajućih svojstvenih vrednosti. Tada su elementi matrice koja reprezentuje operator $\hat{A}$ u ovom bazisu

$$A_{ij} = (e_i, \hat{A}e_j) = (e_i, a_je_j) = a_j(e_i, e_j) = a_j\delta_{ij}, \tag{2.78}$$

tj. na dijagonali matrice (elementi $i = j$) se nalaze svojstvene vrednosti operatora a_i, dok su vandijagonalni matrični elementi ($i \neq j$) jednaki nuli.

Pokazuje se da su operatori koji komutiraju sa svojim adjungovanim operatorima ($\hat{A}\hat{A}^+ = \hat{A}^+\hat{A}$), tzv. *normalni operatori*, najšira klasa operatora u nekom unitarnom prostoru koji mogu biti reprezentovani dijagonalnim matricama i koji, prema tome, imaju svojstveni ortonormirani bazis.

U Hilbertovom prostoru, s druge strane, nije moguće pokazati da svojstveni vektori ma kog ermitskog operatora obrazuju jedan *potpun* ortonormirani skup. Postoji, međutim, klasa ermitskih operatora koji imaju tu osobinu i u kvantnoj mehanici se zovu *opservable*.

Pošto ortonormirani bazis u Hilbertovom prostoru mora biti prebrojiv (videti odeljak 2.1.5), u prvi mah bi se moglo zaključiti da kandidate za opservable treba tražiti isključivo među ermitskim operatorima sa diskretnim spektrom. To, međutim, nije tačno. U nastavku ćemo videti da ermitski operatori sa neprekidnim ili mešovitim spektrima takođe mogu biti opservable.

2.2.6 Neprekidni spektar ermitskog operatora

Spektar ermitskog operatora pored diskretnih može da sadrži i neprekidne svojstvene vrednosti, pri čemu, kao što smo videli, sve svojstvene vrednosti moraju biti realne. Ispostavlja se da svojstveni vektori koji odgovaraju neprekidnim svojstvenim vrednostima nemaju konačnu normu i prema tome ne pripadaju Hilbertovom prostoru ($\mathcal{H}$) u kome operator deluje. Pokazuje se da ovi svojstveni vektori pripadaju jednom širem prostoru (nadprostoru od $\mathcal{H}$) koji pored vektora iz $\mathcal{H}$ sadrži i tzv. *uopštene vektore* koji nemaju konačnu normu. Taj nadprostor se naziva *opremljeni Hilbertov prostor*.[4] Za kvantnu mehaniku je od posebnog značaja činjenica da je u njemu definisan skalarni proizvod između uopštenih vektora i određenog skupa vektora iz $\mathcal{H}$.[5]

Pretpostavimo prvo da ermitski operator $\hat{A}$ ima čisto neprekidni spektar i da je to interval $[a, b] \subset \mathbb{R}$. U tom slučaju skup odgovarajućih svojstvenih vektora je neprebrojiv skup međusobno ortogonalnih uopštenih vektora $\{x_\alpha \,|\, \hat{A}x_\alpha = \alpha x_\alpha, \forall\alpha \in [a, b]\}$.[6] Postavlja se pitanje da li je vektore $x \in \mathcal{H}$ moguće izraziti kao linearne kombinacije vektora x_α, koje zbog neprebrojivosti tog skupa imaju oblik integrala $\int_a^b c(\alpha)x_\alpha \mathrm{d}\alpha$. Potreban uslov za to je egzistencija Furijeovih koeficijenata $c(\alpha) = (x_\alpha, x)$, a ona je obezbeđena činjenicom da su poslednji skalarni proizvodi u praksi uvek definisani. Prema tome, analogno razvoju $x = \sum_i (x_i, x)x_i$ po diskretnom bazisu $\{x_i\}$, imaćemo

$$x = \int_a^b c(\alpha)x_\alpha d\alpha \tag{2.79}$$

ukoliko ovi integrali konvergiraju. Tada možemo reći da je skup vektora x_α neprekidni svojstveni bazis operatora $\hat{A}$ u $\mathcal{H}$, a operator $\hat{A}$ možemo smatrati opservablom.

[4] Engleski naziv: "Rigged Hilbert space".

[5] Pokazalo se da taj skup pokriva praktično sve slučajeve od interesa za kvantnu mehaniku. Iz tog razloga se u kvantnoj mehanici obično ignoriše činjenica da se radi o određenoj klasi vektora iz $\mathcal{H}$, tj. postupa se kao da je taj skup ceo prostor $\mathcal{H}$.

[6] Radi jednostavnosti ovde pretpostavljamo da su svojstvene vrednosti neprekidnog spektra nedegenerisane, tj. da svojstvena vrednost α jednoznačno (s tačnošću do faznog faktora) određuje vektor x_α.

Ispitaćemo sada uslove za konvergenciju integrala (2.79), odnosno važenje navedenih zaključaka.

Ukoliko integral (2.79) konvergira, kvadrat norme vektora $x \in \mathcal{H}$ se može napisati kao integral kvadrata modula Furijeovih koeficijenata $c(\alpha)$, tj.

$$\begin{aligned} \|x\|^2 = (x,x) &= \left(\int_a^b c(\alpha) x_\alpha d\alpha, x \right) = \int_a^b c(\alpha)^* (x_\alpha, x) d\alpha \\ &= \int_a^b c(\alpha)^* c(\alpha) d\alpha = \int_a^b |c(\alpha)|^2 d\alpha. \end{aligned} \tag{2.80}$$

S obzirom da svaki vektor $x \in \mathcal{H}$ ima konačnu normu, sledi

$$\int_a^b |c(\alpha)|^2 d\alpha < +\infty. \tag{2.81}$$

Prema tome, potreban uslov za konvergenciju integrala (2.79) je da Furijeovi koeficijenti koji se u njemu pojavljuju budu kvadratno integrabilne funkcije.

Uočimo dalje da ako integral (2.79) konvergira, sledi

$$c(\alpha) = (x_\alpha, x) = \left(x_\alpha, \int_a^b c(\alpha') x_{\alpha'} d\alpha' \right) = \int_a^b c(\alpha') (x_\alpha, x_{\alpha'}) d\alpha'. \tag{2.82}$$

Da bi se krajnje strane izraza (2.82) mogle izjednačiti, skalarni proizvod vektora neprekidnog svojstvenog bazisa $(x_\alpha, x_{\alpha'})$ mora da bude tzv. Dirakova delta funkcija $\delta(\alpha - \alpha')$ koja ima osobinu da izbacuje vrednost podintegralne funkcije u fiksnoj tački, tj. $\int f(\alpha')\delta(\alpha - \alpha')d\alpha' = f(\alpha)$. Delta funkcija je zamišljena kao funkcija koja svuda ima vrednost nula, osim za $\alpha' = \alpha$ kada postaje beskonačna. Preciznija definicija i osobine ove funkcije su date u sledećem odeljku. Prema tome, ukoliko je ermitski operator sa neprekidnim spektrom opservabla, tj. ukoliko važi izraz (2.79), svojstveni vektori x_α moraju da zadovoljavaju uslov

$$(x_\alpha, x_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha') \tag{2.83}$$

koji predstavlja generalizaciju osobine ortonormiranosti. Kažemo da su svojstvani vektori neprekidnog spektra normirani na delta funkciju, za razliku od svojstvanih vektora diskretnog spektra koji se normiraju na jedinicu.

Posmatrajmo na kraju opšti slučaj kada spektar opservable $\hat{A}$ sadrži i diskretne i neprekidne svojstvene vrednosti, $\{a_1, a_2, \ldots\}$ odnosno $\alpha \in [a, b]$. Tada se svojstveni bazis od $\hat{A}$ sastoji od diskrenog svojstvenog podbazisa $\{x_i\}$, čiji su elementi vektori konačne norme, i od neprekidnog svojstvenog podbazisa $\{x_\alpha\}$, čiji su elementi uopšteni vektori. U tom slučaju razvoj vektora $x \in \mathcal{H}$ po svojstvenom bazisu opservable $\hat{A}$ glasi

$$x = \sum_i c_i x_i + \int_a^b c(\alpha) x_\alpha d\alpha, \tag{2.84}$$

gde su $c_i = (x_i, x)$ i $c(\alpha) = (x_\alpha, x)$ odgovarajući Furijeovi koeficijenti.

2.2.7 Dirakova delta funkcija

Dirakova delta funkcija se obično definiše kao funkcija realnog argumenta x koja ima sledeće osobine

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & x = 0 \\ 0, & x \neq 0 \end{cases} \quad \text{i} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = 1. \tag{2.85}$$

Ona, međutim, dobija pravi smisao tek kada se pojavljuje kao jezgro integralnog operatora. Naime, ako je $f(x)$ neprekidna funkcija, onda je

$$\int_a^b f(x)\,\delta(x - x_0)\,\mathrm{d}x = f(x_0), \quad a < x_0 < b. \tag{2.86}$$

Ova osobina formalno sledi iz definicije (2.85). Na osnovu prvog uslova možemo pisati $f(x)\,\delta(x - x_0) = f(x_0)\,\delta(x - x_0)$, a integracija ove jednakosti po proizvoljnom domenu koji obuhvata tačku x_0, koristeći drugi uslov (normiranje delta funkcije na jedinicu), daje relaciju (2.86).

U praksi se koriste različite reprezentacije delta funkcije. Ova singularna funkcija se najčešće realizuje kao granična vrednost neke normalne raspodele kada širina raspodele teži nuli.[7] Jedna takva reprezentacija je

$$\delta(x) = \lim_{L\to\infty} \frac{\sin(Lx)}{\pi x}. \tag{2.87}$$

Da bismo se uverili da ovaj izraz ima osobine delta funkcije uočimo da za konačne vrednosti parametra L količnik $\sin(Lx)/(\pi x)$ ima graničnu vrednost L/π kada $x \to 0$. Prema tome $\delta(0) = \lim_{L\to\infty} L/\pi \to \infty$. S druge strane je $\int_{-\infty}^{\infty} \sin(Lx)/(\pi x)\,\mathrm{d}x = 1$ za svako $L > 0$, što u graničnom slučaju $L \to \infty$ daje $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = 1$.

Ekvivalentna reprezentacija u kompleksnom obliku glasi

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\,\mathrm{d}k. \tag{2.88}$$

Lako se pokazuje da se ona svodi na prethodnu reprezentaciju

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\,\mathrm{d}k &= \frac{1}{2\pi} \lim_{L\to\infty} \int_{-L}^{L} e^{ikx}\,\mathrm{d}k = \frac{1}{2\pi} \lim_{L\to\infty} \left.\frac{e^{ikx}}{ix}\right|_{k=-L}^{k=L} \\ &= \frac{1}{\pi} \lim_{L\to\infty} \frac{e^{iLx} - e^{-iLx}}{2ix} = \lim_{L\to\infty} \frac{\sin(Lx)}{\pi x}. \end{aligned} \tag{2.89}$$

[7] Sa matematičke tačke gledišta delta funkcija definisana uslovima (2.85) nije funkcija u pravom smislu. Naime, integral bilo koje realne funkcije koja ima vrednost nula svuda osim u jednoj tački bi takođe morao da bude jednak nuli. Švarc (L. Schwartz) je pokazao da matematički korektan način da se uvede delta funkcija je preko normalnih raspodela.

Reprezentacija (2.88) se može izvesti na alterantivan način koristeći Furijeove transformacije i osobinu (2.86). Furijeov razvoj neprekidne funkcije $f(x)$ glasi

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, e^{ikx} \bar{f}(k), \tag{2.90}$$

pri čemu su koeficijenti razvoja određeni Furijeovom transformacijom

$$\bar{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, e^{-ikx} f(x). \tag{2.91}$$

U toj terminologiji razvoj (2.90) se naziva inverzna Furijeova transformacija.[8] Tada je

$$\begin{aligned} f(x_0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, e^{ikx_0} \bar{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, e^{ikx_0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, e^{-ikx} f(x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x f(x) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, e^{ik(x_0 - x)}. \end{aligned} \tag{2.92}$$

Upoređujući ovaj rezultat sa relacijom (2.86) (u granicama integracije od $-\infty$ do $+\infty$) direktno sledi

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, e^{ik(x - x_0)}. \tag{2.93}$$

Delta funkcija se takođe može uvesti preko Hevisajdove (O. Heaviside) funkcije

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1/2, & x = 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases} \tag{2.94}$$

kao njen izvod, tj.

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \to \infty} \frac{\theta(x + \epsilon) - \theta(x)}{\epsilon}. \tag{2.95}$$

Osnovne osobine delta funkcije su

$$\delta(-x) = \delta(x), \tag{2.96}$$

$$x\,\delta(x) = 0, \tag{2.97}$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\,\delta(x), \tag{2.98}$$

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{\left| f'(x_i) \right|}, \tag{2.99}$$

gde su x_i nule funkcije $f(x)$, a $f'(x_i) \equiv (\mathrm{d}f/\mathrm{d}x)_{x=x_i} \neq 0$.

[8] U matematici se u inverznoj Furijeovoj transformaciji umesto faktora $1/\sqrt{2\pi}$ obično uzima faktor $1/(2\pi)$, dok je kod odgovarajuće Furijeove transformacije taj faktor tada jednak jedinici.

U trodimenzionom konfiguracionom prostoru se delta funkcija definiše kao proizvod delta funkcija sa argumentima koji predstavljaju komponente vektora položaja duž tri uzajamno ortogonalna prostorna pravca $\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\,\delta(y)\,\delta(z)$, tj.

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_x x}\,\mathrm{d}k_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_y y}\,\mathrm{d}k_y \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_z z}\,\mathrm{d}k_z = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\mathrm{d}^3\mathbf{k}. \quad (2.100)$$

3 Osnovni pojmovi i principi kvantne mehanike

Osvrćući se na zaključke iz uvodne glave (poglavlje 1.4) izvedene iz analogije između ponašanja svetlosti i snopa čestica, te koristeći matematički formalizam predstavljen u prethodnoj glavi, sada možemo na precizan način da formulišemo osnovne pojmove i principe na kojima je izgrađena kvantna mehanika.

3.1 Talasna funkcija i njena interpretacija

3.1.1 Opis stanja kvantnog sistema pomoću talasne funkcije

Stanje fizičkog sistema u klasičnoj mehanici je u svakom trenutku određeno vrednostima svih nezavisnih koordinata i impulsa (ili komponenti brzina) tog sistema, dakle tačkom u faznom prostoru, a evolucija stanja je predstavljena faznom trajektorijom. U kvantnoj mehanici, zbog nemogućnosti istovremenog poznavanja vrednosti koordinata i impulsa (princip neodređenosti), stanje fizičkog sistema i njegova evolucija se moraju opisati na drugačiji način. Kao što smo videli u uvodnoj glavi, jedan od načina je opis preko talasa koji određuju verovatnoću pojavljivanja sistema u određenoj tački konfiguracionog prostora. Kad je reč o fotonu, taj talas je elektromagnetni talas koji u svakom trenutku nosi sve informaciju o njemu pa možemo reći da karakteriše stanje fotona. Odgovarajući talasni aspekt kod drugih čestica se, međutim, ne može dovesti u vezu sa nekim merljivim fizičkim poljem ali se pokazalo da njegov matematički reprezent, talasna funkcija, uprkos tome adekvatno opisuje njihova kvantna stanja. Celokupno iskustvo u vezi sa ponašanjem kvantnih sistema ukazuje da se može prihvatiti sledeći opšti stav: *Stanje kvantnog sistema je opisano talasnom funkcijom koja sadrži kompletnu informaciju koju je o sistemu u tom stanju moguće dobiti.* Ovaj iskaz u kombinaciji sa principom superpozicije, o kome će biti reči u nastavku, se obično uzima kao postulat o stanjima.[1]

Talasna funkcija je u opštem slučaju kompleksna, jednoznačna i neprekidna funkcija svih nezavisnih koordinata sistema i vremena. Tradicionalno se označava grčkim slovom ψ ("psi"), što naravno ne ograničava upotrebu i drugih simbola. Formulacija kvantne mehanike u kojoj se kvantna stanja predstavljaju talasnim funkcijama, kao što je već pomenuto, naziva se talasna mehanika i mi ćemo u prvom delu ovog kursa

[1] Kvantna stanja o kojima je ovde reč su tzv. čista stanja (v. poslednji odeljak prve glave). Mešana stanja, koja ne sadrže maksimalnu informaciju o sistemu i koja nije moguće opisati talasnom funkcijom, će biti razmatrana u drugom delu ovog kursa (Kvantna mehanika 2).

(Kvantna mehanika 1) koristiti taj prilaz. U narednoj glavi ćemo videti da su talasne funkcije rešenja Šredingerove jednačine koja određuje vremensku evoluciju kvantnog sistema.

U nastavku ćemo, polazeći od empirijskih činjenica, pokazati kakav oblik treba da imaju funkcije koje opisuju stanja slobodne čestice datog impulsa i energije. Na osnovu toga ćemo, koristeći princip superpozicije i činjenicu da ove funkcije čine potpun skup funkcija u prostoru stanja čestice, biti u mogućnosti da proučavamo osobine kvantnih stanja u opštem slučaju, kao i vrednosti fizičkih veličina u tim stanjima.

3.1.2 Kretanje slobodne čestice. Ravni talasi

Eksperimenti sa rasejanjem snopa elektrona određene energije E i impulsa $\mathbf{p}$ na periodičnim strukturama kao što su kristali (npr. Dejvison-Džermerov eksperiment) su pokazali da prostorna raspodela rasejanih elektrona odgovara difrakcionom obrascu koji bi se dobio pri difrakciji ravnog upadnog talasa talasne dužine $\lambda = h/p$ i talasnog vektora $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$. Pošto se kretanje elektrona u upadnom snopu može smatrati slobodnim, ovim eksperimentima, osim što je potvrđena de Broljeva hipoteza, došlo se do zaključka da se kretanje slobodne čestice (ili snopa čestica) impulsa $\mathbf{p}$ može opisati ravnim (de Broljevim) talasom

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}, \tag{3.1}$$

gde je $\omega = E/\hbar$. Nezavisno promenljive $\mathbf{r}$ i t su vektor položaja (tri nezavisne koordinate) u konfiguracionom prostoru čestice i vreme. Koristeći relacije (1.3) između $\mathbf{k}$, ω i $\mathbf{p}$, E, talas (3.1) se može napisati i u obliku

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)}. \tag{3.2}$$

Ovde je zanimljivo uporediti brzinu prostiranja talasa (3.1) sa brzinom koju bi prema klasičnoj mehanici imala čestica impulsa $\mathbf{p}$. Brzina prostiranja talasa se može odrediti kao brzina pomeranja konstantne vrednosti njegove faze. Radi jednostavnosti, pretpostavimo da se talas kreće duž x-ose. Pomenuta brzina se tada dobija iz uslova $kx - \omega t = \text{const}$. Ako posmatramo fazu u nekom kasnijem trenutku $t + \Delta t$, da bi navedeni uslov bio zadovoljen, koordinata mora da se promeni za vrednost Δx koja sledi iz jednakosti $k\Delta x - \omega\Delta t = 0$. Prema tome, brzina prostiranja konstantne faze talasa $\Delta x/\Delta t$, tzv. *fazna brzina* talasa, iznosi

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p}. \tag{3.3}$$

U nerelativističkom slučaju energija slobodne čestice se svodi na njenu kinetičku energiju, dakle $E = \mathbf{p}^2/(2m)$, pri čemu je m masa čestice. Iz izraza (3.3) tada sledi $v_f = p/(2m)$, dok je klasična brzina čestice $v = p/m$.[2] Prema tome, prostiranje talasa

[2] Ako primenimo relativističke izraze za energiju i impuls, $E = mc^2$ odnosno $p = mv$, gde je sada m relativistička vrednost mase čestice pri brzini v, dobićemo $v_f = c^2/v$. U slučaju svetlosti (fotona) je $v = c$, tako da je i $v_f = c$. Međutim, za čestice nenulte mase mirovanja uvek je $v < c$, odakle sledi $v_f > c$. Iako se vrednosti za v_f u relativističkom i nerelativističkom prilazu razlikuju, vidimo da se u oba slučaja v_f razlikuje od klasične brzine čestice.

(3.1) se ne može poistovetiti sa kretanjem čestice. Videćemo, međutim, da se superpozicijom (slaganjem) ravnih talasa različitih talasnih brojeva i frekvencija dobijaju talasi čija se tzv. grupna brzina može dovesti u vezu sa brzinom čestice. Pitanje da li tako dobijeni talasi predstavljaju neko kvantno stanje je od suštinskog značaja za kvantnu mehaniku. Odgovor leži u principu superpozicije.

3.1.3 Princip superpozicije

Princip superpozicije je opšti princip koji važi za sve linearne sisteme. Linearni sistemi se matematički mogu opisati nekim sistemom linearnih (algebarskih ili diferencijalnih) jednačina, a princip superpozicije tada kaže da proizvoljna linearna kombinacija dva rešenja tog sistema jednačina takođe predstavlja neko njegovo rešenje. U slučaju svetlosti princip superpozicije je posledica linearnosti Maksvelovih jednačina. Analogija u ponašanju snopa fotona i drugih čestica, o kojoj je bilo reči u uvodnoj glavi, ukazuje da ovaj princip mora da važi i za stanja u kvantnoj mehanici.

Princip superpozicije se može iskazati na sledeći način: *Ako se kvantni sistem može nalaziti u stanjima opisanim talasnim funkcijama ψ_1 i ψ_2, onda se on može nalaziti i u stanju koje je opisano linearnom kombinacijom (superpozicijom) tih funkcija, tj.*

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2, \quad \forall c_1, c_2 \in \mathbb{C}. \tag{3.4}$$

Ovaj iskaz uključuje i trivijalni slučaj kada je jedan od koeficijenata c_i ($i = 1, 2$) jednak nuli, tj. kada se talasna funkcija množi sa kompleksnim brojem različitim od nule. U kvantnoj mehanici se, međutim, podrazumeva da talasne funkcije ψ i $c\psi$ ($c \in \mathbb{C}$) opisuju *isto* kvantno stanje. U odeljku 3.1.5 ćemo videti da se u cilju određivanja verovatnoće talasne funkcije normiraju, čime se razlika između ψ i $c\psi$ svodi na tzv. fazni faktor.

Očigledno, da bi princip superpozicije važio, jednačine kvantne mehanike moraju biti linearne. Ovo je jedan od najznačajnijih uslova koji određuje formu Šredingerove talasne jednačine. Takođe, zahvaljujući principu superpozicije, skup svih talasnih funkcija nekog kvantnog sistema čini jedan linearni (vektorski) prostor koji nazivamo *prostorom stanja* tog sistema (v. odeljak 2.1.5). U nastavku (odeljak 3.1.5) ćemo videti da je prostor stanja po svojoj strukturi Hilbertov prostor.

Princip superpozicije, koji je fundamentalan za kvantnu mehaniku, nema svoj analogon u klasičnoj fizici. Jedna od posledica ovog principa je da fizičke veličine, suprotno očekivanju klasične mehanike, nemaju obavezno određenu vrednost u svim stanjima kvantnog sistema. Neka su npr. ψ_1 i ψ_2 de Broljevi talasi pridruženi čestici sa određenim (ali različitim) vrednostima impulsa ($\mathbf{p}_1 = \hbar\mathbf{k}_1$, $\mathbf{p}_2 = \hbar\mathbf{k}_2$) i energije ($E_1 = \mathbf{p}_1^{\,2}/2m$, $E_2 = \mathbf{p}_2^{\,2}/2m$), tj. ravni talasi

$$\psi_1 = A_1 e^{i(\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}-\omega_1 t)}, \quad \psi_2 = A_2 e^{i(\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}-\omega_2 t)}. \tag{3.5}$$

Superpozicija (3.4) ovih talasa se ne može okarakterisati određenom vrednošću impulsa (i energije) jer se rezultujući talas ψ ne može predstaviti kao ravan talas sa jednom vrednošću talasnog vektora (osim u trivijalnim slučajevima kada je jedan od koeficijenta c_i ($i = 1, 2$) jednak nuli).

3.1.4 Grupna brzina talasa. Talasni paket

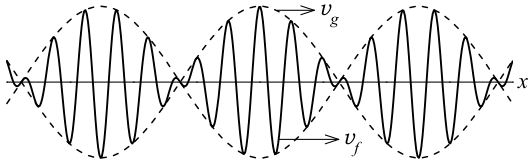
Razmotrimo sada superpoziciju dva ravna talasa bliskih frekvencija i talasnih brojeva, $\omega - \Delta\omega/2$ i $\omega + \Delta\omega/2$ ($\Delta\omega \ll \omega$) odnosno $k - \Delta k/2$ i $k + \Delta k/2$ ($\Delta k \ll k$), i jednakih amplituda. Radi jednostavnosti ćemo se ograničiti na jednodimenzioni slučaj kada se oba talasa prostiru duž x-ose. Rezultujući talas tada ima oblik

$$\begin{aligned}\psi &= Ae^{i\left[\left(k-\frac{\Delta k}{2}\right)x-\left(\omega-\frac{\Delta\omega}{2}\right)t\right]} + Ae^{i\left[\left(k+\frac{\Delta k}{2}\right)x-\left(\omega+\frac{\Delta\omega}{2}\right)t\right]} \\ &= 2A\cos\left(\frac{\Delta\omega t - \Delta k x}{2}\right)e^{i(kx-\omega t)}.\end{aligned} \tag{3.6}$$

Dobijeni talasni proces se može tretirati kao talas frekvencije ω, talasnog broja k i amplitude $2A\cos[(\Delta\omega t - \Delta k x)/2]$ koja se periodično menja (slika 3.1). Pošto je $\Delta\omega \ll \omega$, $\Delta k \ll k$, promena amplitude talasa je mnogo sporija od promene faze. Brzina prostiranja promene amplitude, tzv. *grupna brzina* talasa, dobija se iz uslova $(\Delta\omega t - \Delta k x)/2 = \text{const}$ na analogan način kao za faznu brzinu, tj. $v_g \equiv \Delta x/\Delta t = \Delta\omega/\Delta k$. Ako pustimo da $\Delta\omega \to 0$ i $\Delta k \to 0$, za slobodnu česticu sledi

$$v_g = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\left(\frac{p^2}{2m}\right) = \frac{p}{m} = v, \tag{3.7}$$

tj. grupna brzina talasa je jednaka brzini čestice kojoj su talasi pridruženi.



Slika 3.1. Talas koji predstavlja rezultat superpozicije dva ravna talasa bliskih frekvencija i talasnih brojeva, i jednakih amplituda (prikazan je njegov realni deo).

Na osnovu ove analize proizilazi da talasni proces koji bi pratio kretanje čestice ne može biti čisto monohromatski (tj. određene vrednosti $\mathbf{k}$), već mora imati neku širinu, odnosno uključivati više različitih talasnih vektora (a time i frekvencija). Superpozicijom beskonačno mnogo ravnih talasa sa talasnim brojevima koji se kontinualno menjaju u određenom intervalu

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int A(\mathbf{k})\, e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega(\mathbf{k})t)}\, \mathrm{d}\mathbf{k}, \tag{3.8}$$

dobija se talas koji je lokalizovan u ograničenom delu prostora, što znači da amplituda talasa izvan te oblasti brzo opada i u beskonačnosti teži nuli (npr. kao na slici 3.2). Takav talasni proces se naziva *talasni paket*.

Razmotrimo kao primer superpoziciju ravnih talasa čiji su talasni vektori usmereni u pravcu x-ose sa vrednostima u granicama $k_0 - \Delta k \leq k \leq k_0 + \Delta k$ ($k = |\mathbf{k}|$), tj.

$$\psi(x,t) = \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} A(k) e^{i(kx-\omega t)} \mathrm{d}k. \tag{3.9}$$

Ako je $\Delta k \ll k_0$, pogodno je uvesti smenu $\xi = k - k_0$ i razviti funkciju $\omega(k)$ oko vrednosti $k = k_0$, ograničavajući se na nulti i linearni član

$$\omega(k) \approx \omega_0 + \left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_0 \xi, \quad \omega_0 \equiv \omega(k_0). \tag{3.10}$$

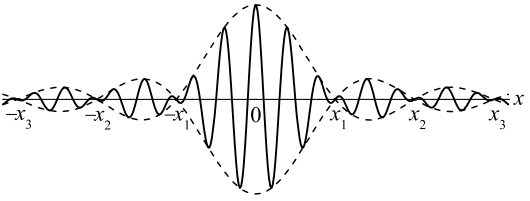
(Za slobodnu česticu je $\omega = E/\hbar = \hbar k^2/(2m)$, $\omega_0 = \hbar k_0^2/(2m)$ i $(\mathrm{d}\omega/\mathrm{d}k)_0 = \hbar k_0/m$.) Uzimajući, osim toga, da se koeficijenti A sporo menjaju sa k, tj. da je $A(k) \approx A(k_0)$, sledi

$$\begin{aligned}
\psi(x,t) &\approx \int_{-\Delta k}^{\Delta k} A(k_0) e^{i\left[(k_0+\xi)x - \omega_0 t - \left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_0 \xi t\right]} \mathrm{d}\xi \\
&= A(k_0) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i\left[x - \left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_0 t\right]\xi} d\xi \\
&= A(k_0) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \left. \frac{e^{i\left[x - \left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_0 t\right]\xi}}{i\left[x - \left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_0 t\right]} \right|_{\xi=-\Delta k}^{\xi=\Delta k},
\end{aligned} \tag{3.11}$$

što daje

$$\psi(x,t) \approx 2A(k_0) \frac{\sin\left\{\left[x - \left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_0 t\right]\Delta k\right\}}{x - \left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_0 t} \; e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}. \tag{3.12}$$

Množitelj ispred brzo oscilujuće funkcije $e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$ se može tretirati kao sporo promenljiva amplituda talasnog procesa okarakterisanog talasnim brojem k_0 i frekvencijom ω_0.



Slika 3.2. Realni deo talasnog paketa (3.12) za $t = 0$ (puna linija) i njegova "amplituda" (isprekidana linija).

Na slici 3.2 je prikazan talasni paket (3.12) u trenutku $t = 0$. Amplituda talasnog paketa tada ima izražen maksimum u $x = 0$ sa vrednošću $2A(k_0) \lim_{x\to 0} \sin(x\,\Delta k)/x = 2A(k_0)\Delta k$. Nule amplitude su locirane u tačkama $x_n = (\pi/\Delta k)n$, $n = \pm 1, \pm 2, \ldots$

Za $|x| > x_1$ amplituda talasnog paketa brzo opada pa možemo smatrati da je paket lokalizovan između $-x_1$ i x_1, tj. da mu je prostorna širina $\Delta x = 2x_1 = 2\pi/\Delta k$. Odavde sledi $\Delta x\,\Delta k = 2\pi$ odnosno

$$\Delta x\,\Delta p = h. \tag{3.13}$$

Vidimo da što je vrednost Δp (odnosno Δk) veća, to će prostorna širina paketa biti manja. U graničnom slučaju $\Delta p \to \infty$ amplituda talasnog paketa (3.12) uzima oblik delta funkcije (videti definiciju (2.85)) i talasni paket je lokalizovan u jednoj tački ($x = 0$ ako je $t = 0$), tj. $\Delta x \to 0$. Ukoliko, međutim, uzmemo da $\Delta p \to 0$, talasni paket postaje potpuno delokalizovan ($\Delta x \to \infty$) i praktično se svodi na monohromatski ravni talas frekvencije ω_0 i talasnog broja k_0. Uz pretpostavku da amplituda talasnog paketa predstavlja (ili je proporcionalna) amplitudi verovatnoće nalaženja čestice u prostoru (u ovom slučaju duž x-ose), o čemu će biti reči u narednom odeljku, poslednja relacija se može tumačiti kao relacija neodređenosti za položaj i impuls čestice u stanju opisanom ovim talasnim paketom.

Posmatrajući fazu amplitude paketa $[x - (\mathrm{d}\omega/\mathrm{d}k)_0 t]\Delta k$ sledi da se srednja tačka ovog talasnog paketa u toku vremena pomera brzinom

$$v_g = \left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_0, \tag{3.14}$$

koja predstavlja *grupnu brzinu* talasnog paketa. Uočimo da je za slobodnu česticu

$$v_g = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}\left(\frac{E}{\hbar}\right)_0 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}\left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right)_0 = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m}. \tag{3.15}$$

Ukoliko je moguće zanemariti neodređenost impulsa Δp, vrednost p_0/m se može interpretirati kao klasična brzina čestice. Prema tome, u klasičnom limitu (npr. u slučaju dovoljno velike mase m), kada možemo govoriti o klasičnoj brzini čestice, grupna brzina talasnog paketa se poklapa sa ovom brzinom. Pokazuje se da navedena relacija važi i u slučaju kretanja čestice u polju spoljašnjih sila.

Jedno od prvih tumačenja gornjeg rezultata je bilo da se sama čestica može poistovetiti sa talasnim paketom. Ovakvo shvatanje je, međutim, brzo dovedeno u pitanje zbog efekta tzv. *rasplinjavanja talasnog paketa*. Naime, ukoliko je $(\mathrm{d}^2\omega/\mathrm{d}k^2)_{k=k_0} \neq 0$, ravni talasi sadržani u talasnom paketu imaju različite fazne brzine tako da se talasni paket brzo rasformira. Ovo se dešava čak i kad na česticu ne deluju nikakve spoljašnje sile, tj. pri slobodnom kretanju (tada je $(\mathrm{d}^2\omega/\mathrm{d}k^2)_{k=k_0} = \hbar/m$). Kako se, međutim, čestice uvek registruju u celini (nedeljive su), ovakvo shvatanje talasnog paketa je danas uglavnom odbačeno. Savremena interpretacija ovih talasa je da njihova amplituda ustvari određuje verovatnoću nalaženja čestice u datoj tački prostora.

3.1.5 Statistička interpretacija talasne funkcije

Da bi rezultati Dejvison-Džermerovog eksperimenta i drugih eksperimenata sa rasejanjem snopa čestica na periodičnim strukturama mogli biti protumačeni kao posledica talasnih svojstava čestica, neophodno je pretpostaviti da je raspodela čestica u

prostoru nakon rasejanja proporcionalna intenzitetu talasa na tom mestu. Međutim, objašnjenje da ovi talasi predstavljaju efekat kolektivnog ponašanja velikog broja čestica (kao npr. u slučaju zvučnih talasa) ovde nije prihvatljivo. To sledi iz činjenice da se difrakcioni obrazac dobija nakon detekcije velikog broja čestica, nezavisno od toga da li one stižu istovremeno ili jedna po jedna u dužem vremenskom intervalu (odeljak 1.4.1). Ove činjenice su navele Borna (Max Born, 1926) da predloži statističku interpretaciju talasne funkcije. Prema toj interpretaciji intenzitet de Broljevih talasa na bilo kom mestu u prostoru i u datom trenutku vremena proporcionalan je verovatnoći nalaženja čestice na tom mestu.

Navedena interpretacija de Broljevih talasa se direktno uopštava na talasnu funkciju koja opisuje stanje proizvoljnog kvantnog sistema: Ako je ξ skup svih nezavisnih koordinata sistema, a $\psi(\xi, t)$ talasna funkcija koja opisuje kvantno stanje u kome se sistem nalazi u trenutku t, onda je *verovatnoća* $\mathrm{d}\mathcal{P}$ *da se pri merenju koordinata u tom trenutku dobiju vrednosti iz elementa konfiguracionog prostora* $\mathrm{d}\xi$ *oko tačke* ξ *proporcionalna proizvodu kvadrata modula talasne funkcije u toj tački i trenutku* t *i elementa prostora* $\mathrm{d}\xi$, tj.

$$\mathrm{d}\mathcal{P} = C\,|\psi(\xi, t)|^2 \mathrm{d}\xi, \tag{3.16}$$

gde je $C > 0$ konstanta normiranja.

Prema ovoj interpretaciji (već pomenuta Kopenhagenška škola) talasna funkcija ne predstavlja neko merljivo fizičko polje ili veličinu, već jedan od načina da se matematički opiše kvantno stanje. Kao što smo već naveli na početku ovog poglavlja, talasna funkcija sadrži kompletnu informaciju o kvantnom stanju, što znači da se o dinamičkim varijablama fizičkog sistema koji se nalazi u tom stanju ne može saznati ništa više osim onog što omogućava talasna funkcija.[3] Ova činjenica kao posledicu ima jedan od najopštijih principa u kvantnoj mehanici – princip neodređenosti.

Verovatnoća nalaženja sistema sa koordinatama unutar neke konačne oblasti konfiguracionog prostora dobija se integracijom relacije (3.16) po toj oblasti. Pri tome integral po celom konfiguracionom prostoru u svakom trenutku odgovara verovatnoći nalaženja sistema sa bilo kojim vrednostima koordinata, što predstavlja apsolutno siguran događaj čija je verovatnoća jednaka jedinici. Prema tome

$$1 = C \int |\psi(\xi, t)|^2 \mathrm{d}\xi. \tag{3.17}$$

Uočimo da se konstanta normiranja C može odrediti jedino ukoliko integral na desnoj strani konvergira, tj. ako je ψ po modulu kvadratno integrabilna funkcija

$$\int |\psi(\xi, t)|^2 \mathrm{d}\xi < +\infty. \tag{3.18}$$

[3] Ovaj stav nikada nije bio prihvaćen od izvesne grupe fizičara iz vremena nastanka kvantne mehanike na čelu sa Ajnštajnom, a i kasnije, koji su smatrali da stanje fizičkog sistema, kako je formulisano u kvantnoj mehanici, ne daje potpuni opis sistema. Prema njima kvantna mehanika nije kompletna teorija, a informacije koje nedostaju, tzv. skrivene varijable, bi u kompletnoj teoriji eliminisale neodređenost i omogućile deterministički opis.

Ova činjenica ukazuje da jedino funkcije koje imaju ovu osobinu mogu u potpunosti opisivati kvantna stanja. Za kvadratno integrabilne funkcije integral (3.18) predstavlja kvadrat njihove norme, pri čemu je skalarni proizvod među ovim funkcijama definisan kao (v. odeljak 2.1.5)

$$(\psi, \psi') = \int \psi^*(\xi)\, \psi'(\xi)\, \mathrm{d}\xi. \tag{3.19}$$

Uz skalarni proizvod (3.19) i ograničenje na kvadratno integrabilne funkcije, prostor stanja kvantnog sistema predstavlja jedan funkcionalni Hilbertov prostor.

Radi računanja verovatnoće pogodno je kvadratno integrabilne funkcije normirati na jedinicu. Transformacijom

$$\psi \to \sqrt{C}\, \psi \tag{3.20}$$

se dobija nova funkcija $\psi(\xi)$ za koju je

$$\int |\psi(\xi, t)|^2 \mathrm{d}\xi = 1. \tag{3.21}$$

Pri tome početna i normirana talasna funkcija opisuju isto kvantno stanje jer se razlikuju samo za nenulti faktor $\sqrt{C}$. Za normirane funkcije, međutim, znak proporcionalnosti u izrazu (3.16) prelazi u znak jednakosti, tj.

$$\mathrm{d}\mathcal{P} = |\psi(\xi, t)|^2 \mathrm{d}\xi, \tag{3.22}$$

a veličina

$$\rho(\xi, t) = \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}(\xi, t)}{\mathrm{d}\xi} = |\psi(\xi, t)|^2 \tag{3.23}$$

predstavlja gustinu verovatnoće.

Uočimo da su gustine verovatnoća za stanja opisana talasnim funkcijama ψ i $e^{i\alpha}\psi$, gde je α proizvoljan realan broj, međusobno jednake ($|e^{i\alpha}\psi|^2 = e^{-i\alpha}\psi^* e^{i\alpha}\psi = \psi^*\psi = |\psi|^2$) u bilo kom trenutku i u bilo kojoj tački konfiguracionog prostora. Kasnije ćemo videti da fazni faktor $e^{i\alpha}$ takođe ne utiče na vrednosti drugih merljivih veličina, tako da možemo smatrati da funkcije ψ i $e^{i\alpha}\psi$ opisuju isto kvantno stanje. Prema tome, kod pridruživanja talasnih funkcija kvantnim stanjima, čak i kada su funkcije normirane na jedinicu, postoji nejednoznačnost do na fazni faktor.[4]

Napomenimo da se u kvantnoj mehanici pored kvadratno integrabilnih funkcija koriste i funkcije koje nemaju konačnu normu. U odeljku 3.1.2 smo npr. kretanje slobodne čestice sa određenom vrednošću impulsa opisali monohromatskim ravnim talasom oblika (3.1), odnosno (3.2). Za njega važi $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |A|^2 = \text{const}$, pa je integral po celom konfiguracionom prostoru čestice

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \mathrm{d}V = |A|^2 \int \mathrm{d}V = \infty, \tag{3.24}$$

[4]Ovde, međutim, treba imati na umu da ukoliko se fazni faktori talasnih funkcija koje ulaze u neku linearnu kombinaciju promene nezavisno jedni od drugih, onda rezultujuća talasna funkcija opisuje suštinski drugačije stanje pošto se na taj način menjaju koeficijenti u superpoziciji stanja.

što znači da ψ nije kvadratno integrabilna funkcija. Međutim, strogo govoreći, u kvantnoj mehanici se kretanju slobodne čestice nikad ne može pripisati tačno određena vrednost impulsa. U suprotnom bi, na osnovu relacija neodređenosti, čestica bila potpuno delokalizovana u prostoru, što ne odgovara nijednoj realnoj situaciji. Ravni talas, prema tome, predstavlja idealizaciju, a realna kvantna stanja su opisana manje ili više lokalizovanim talasnim paketima. U prilog tome ide i činjenica da se, za razliku od fazne brzine koja karakteriše monohromatski talas, grupna brzina njihove superpozicije (talasnog paketa) može dovesti u vezu sa kretanjem čestice.

Ipak u mnogim slučajevima (npr. u teoriji rasejanja) monohromatski ravni talas predstavlja savršenu aproksimaciju za opis stanja snopa čestica određene energije i impulsa. Naime, s obzirom na makroskopske dimenzije snopa, neodređenost impulsa se može smatrati zanemarljivom, što u praksi znači da je daleko manja od eksperimentalne preciznosti njegovog merenja. Ovde se, međutim, javlja problem pri izračunavanju verovatnoće pošto za funkcije ψ koje nisu normirane, $|\psi|^2$ nije gustina verovatnoće. Ipak, i u ovakvim slučajevima $|\psi|^2$ je proporcionalno relativnoj verovatnoći, npr. odnos vrednosti $|\psi|^2$ u raznim tačkama konfiguracionog prostora određuje relativnu verovatnoću za odgovarajuće vrednosti koordinata.

Konačno za kvantnu mehaniku je veoma značajno da skup monohromatskih ravnih talasa sa svim mogućim talasnim vektorima, iako on sam ne pripada prostoru stanja čestice, predstavlja bazis po kome je moguće razviti proizvoljnu talasnu funkciju koja je element tog prostora.[5] Štaviše u nastavku ćemo videti kako se može postići kvadratna integrabilnost ravnih talasa (bez formiranja talasnih paketa) i na taj način konstruisati bazis koji i formalno pripada prostoru stanja čestice.

3.1.6 Normiranje ravnih talasa u ograničenoj zapremini

U prethodnom odeljku smo videli da monohromatski ravni talasi (3.1) nisu kvadratno integrabilne funkcije. Kvadratna integrabilnost se može postići ograničavanjem domena funkcije na neku oblast konfiguracionog prostora konačne zapremine V. U tom slučaju umesto rezultata (3.24) imamo

$$\int_V |\psi|^2 \mathrm{d}V = |A|^2 \int_V \mathrm{d}V = |A|^2 V < \infty. \tag{3.25}$$

Prema tome, talas će biti jedinične norme ako je $|A| = 1/\sqrt{V}$.

Najjednostavnija fizička situacija na koju se ovaj prilaz može primeniti je kretanje čestice unutar ograničenog dela prostora oblika kocke sa idealno čvrstim zidovima. Pošto čestica ne može da napusti ovu oblast, talasna funkcija čestice na granicama oblasti i izvan nje mora biti jednaka nuli. Ovi granični uslovi, međutim, nisu pogodni za normiranje ravnih talasa pošto se na zidovima kocke talas reflektuje i menja znak impulsa. Iz tog razloga je pogodnije izabrati periodične granične uslove zahtevajući da talasna funkcija ima istu vrednost u odgovarajućim tačkama na suprotnim stranicama kocke i isti izvod u tim tačkama po koordinati normalnoj na te stranice. Ako je

[5] Ovo je primer bazisa čiji su elementi tzv. uopšteni vektori, o čemu je bilo reči u odeljku 2.2.6.

L dužina ivice kocke, periodični granični uslovi glase

$$\psi(x, y, z) = \psi(x + L, y, z) = \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z + L). \tag{3.26}$$

Nametanje periodičnih graničnih uslova je ekvivalentno situaciji u kojoj je ceo konfiguracioni prostor podeljen na jednake oblasti oblika kocke, pri čemu se talasna funkcija glatko nastavlja iz oblasti u oblast i u svakoj od njih ima identičan oblik.

Naglasimo da periodični granični uslovi (3.26), s druge strane, ne opisuju korektno realnu dinamiku čestice u ograničenom delu prostora.[6] Ako, međutim, izaberemo kocku dovoljno velike zapremine (sa ivicama mnogo većim od atomskih dimenzija), uticaj graničnih uslova na kretanje čestice u ovoj oblasti će biti zanemarljiv. Naime, amplituda talasnog paketa na udaljenim granicama oblasti teži nuli, čestica praktično nikad ne stiže do njih i sa te strane je oblik graničnih uslova bez značaja. Kako je ovde razlog ograničavanja konfiguracionog prostora konstrukcija bazisa sa normiranim funkcijama oblika ravnih talasa, u nastavku ćemo zadržati periodične granične uslove (3.26) uz pretpostavku da je zapremina $V = L^3$ dovoljno velika. U tom cilju dovoljno je uzeti normirane monohromatske ravne talase u trenutku $t = 0$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}}\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \tag{3.27}$$

Ograničavanje oblasti konfiguracionog prostora ima za posledicu da komponente talasnog vektora $\mathbf{k}$ više ne mogu imati proizvoljne vrednosti. Primenjujući uslove (3.26) na funkcije (3.27) sledi

$$\begin{aligned}
\psi_{\mathbf{k}}(x + L, y, z) &= \frac{1}{L^{3/2}}\, e^{i[k_x(x+L)+k_y y+k_z z]} = e^{ik_x L}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),\\
\psi_{\mathbf{k}}(x, y + L, z) &= \frac{1}{L^{3/2}}\, e^{i[k_x x+k_y(y+L)+k_z z]} = e^{ik_y L}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),\\
\psi_{\mathbf{k}}(x, y, z + L) &= \frac{1}{L^{3/2}}\, e^{i[k_x x+k_y y+k_z(z+L)]} = e^{ik_z L}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}).
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Uslovi periodičnosti se prema tome svode na uslove $e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1$ koji su zadovoljeni ako je $k_x L = 2\pi n_x$, $k_y L = 2\pi n_y$ i $k_z L = 2\pi n_z$, gde su n_x, n_y, n_z celi brojevi. Prema tome komponente talasnog vektora $\mathbf{k}$ više nisu neprekidne veličine već uzimaju diskretne vrednosti

$$k_x = \frac{2\pi}{L}\, n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L}\, n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L}\, n_z. \tag{3.29}$$

Uočimo da u graničnom slučaju kada $L \to \infty$ rastojanja među susednim vrednostima komponenti talasnog vektora teže nuli, što se svodi na slučaj slobodne čestice u neograničenom prostoru sa proizvoljnim (neprekidnim) vrednostima k_x, k_y, k_z.

[6] U klasičnom prilazu periodični granični uslovi bi značili da prolazak čestice kroz stranicu kocke predstavlja ekvivalentan događaj njenom pojavljivanju u odgovarajućoj tački na suprotnoj stranici kocke sa nepromenjenim vektorom impulsa.

Pokazaćemo, dalje, da je skup funkcija $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ (u ograničenom delu prostora) za sve dozvoljene vrednosti $\mathbf{k}$ *ortonormiran* (uzimajući $A = L^{-3/2}$). Posmatrajmo iz tog razloga skalarni proizvod dvaju funkcija sa talasnim vektorima $\mathbf{k}$ i $\mathbf{k}'$

$$\begin{aligned}(\psi_{\mathbf{k}}, \psi_{\mathbf{k}'}) &\equiv \int_V \psi^*_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})\, \mathrm{d}V = \frac{1}{L^3} \int_V e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \mathrm{d}V = \frac{1}{L^3} \int_V e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \mathrm{d}V \\ &= \frac{1}{L} \int_0^L e^{i(k'_x - k_x)x} \mathrm{d}x\, \frac{1}{L} \int_0^L e^{i(k'_y - k_y)y} \mathrm{d}y\, \frac{1}{L} \int_0^L e^{i(k'_z - k_z)z} \mathrm{d}z. \end{aligned} \tag{3.30}$$

Analizirajmo integral po komponenti x. Ako je $k_x = k'_x$ imamo $\frac{1}{L}\int_0^L e^{i(k'_x - k_x)x}\, \mathrm{d}x = 1$. Ako je, međutim, $k_x \neq k'_x$ ($n_x \neq n'_x$) sledi

$$\frac{1}{L} \int_0^L e^{i(k'_x - k_x)x} \mathrm{d}x = \frac{1}{L} \frac{e^{i(k'_x - k_x)x}}{i(k'_x - k_x)} \bigg|_0^L = \frac{e^{i(k'_x - k_x)L} - 1}{iL(k'_x - k_x)} = \frac{e^{2\pi i(n'_x - n_x)} - 1}{2\pi i(n'_x - n_x)} = 0. \tag{3.31}$$

Prema tome, $\frac{1}{L}\int_0^L e^{i(k'_x - k_x)x} \mathrm{d}x = \delta_{k_x, k'_x}$ i analogno za preostala dva integrala, što konačno daje

$$(\psi_{\mathbf{k}}, \psi_{\mathbf{k}'}) \equiv \int_V \psi^*_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})\, \mathrm{d}V = \delta_{k_x, k'_x}\, \delta_{k_y, k'_y}\, \delta_{k_z, k'_z} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \tag{3.32}$$

Funkcije $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ takođe čine *potpun* skup funkcija, tj. proizvoljna funkcija $\psi(\mathbf{r})$ koja opisuje stanje čestice[7] u zapremini V može se predstaviti kao linearna kombinacija ovih funkcija

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}\, \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{3.33}$$

Za to je dovoljno pokazati da je za proizvoljnu funkciju $\psi(\mathbf{r})$ moguće odrediti koeficijente razvoja $c_{\mathbf{k}}$. Ako razvoj (3.33) pomnožimo skalarno sa $\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$, sledi $(\psi_{\mathbf{k}'}, \psi) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}\, (\psi_{\mathbf{k}'}, \psi_{\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}\, \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = c_{\mathbf{k}'}$, tj.

$$c_{\mathbf{k}} = (\psi_{\mathbf{k}}, \psi) \equiv \int_V \psi^*_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, \psi(\mathbf{r})\, \mathrm{dV} = \frac{1}{V} \int_V e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r})\, \mathrm{d}V. \tag{3.34}$$

Uočimo da je poslednji integral inverzna Furijeova transformacija funkcije $\psi(\mathbf{r})$, a pošto su talasne funkcije po definiciji jednoznačne i neprekidne, ovi integrali (tj. Furijeovi koeficijenti $c_{\mathbf{k}}$) postoje za svako $\mathbf{k}$.

Konačno, pošto je skup funkcija $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ okarakterisanih talasnim vektorima $\mathbf{k}$ koji zadovoljavaju uslove (3.29) ortonormiran i potpun, on čini *ortonormirani bazis* u prostoru stanja čestice koja se nalazi u ograničenom delu prostora.

Ako je funkcija $\psi(\mathbf{r})$ normirana u zapremini V onda je

$$\begin{aligned} 1 &= \int_V \psi^*(\mathbf{r})\, \psi(\mathbf{r})\, \mathrm{d}V = \int_V \sum_{\mathbf{k}} c^*_{\mathbf{k}}\, \psi^*_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'} \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})\, \mathrm{d}V \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} c^*_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k}'} \int_V \psi^*_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})\, \mathrm{d}V = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} c^*_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}} c^*_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \tag{3.35}$$

[7] Pošto je vremenski trenutak takođe proizvoljan, t ne pišemo eksplicitno.

odnosno

$$\sum_{\mathbf{k}} |c_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \tag{3.36}$$

U skladu sa statističkom interpretacijom talasne funkcije (odeljak 3.1.5), jedinica na levoj strani izraza (3.35) predstavlja totalnu verovatnoću koja uključuje sve rezultate koji se mogu dobiti merenjem položaja čestice u njenom konfiguracionom postoru (ovde u oblasti zapremine V). U izrazu (3.36) ova jedinica je razložena na sumu kvadrata modula koeficijenta u razvoju talasne funkcije po ravnim talasima (3.27). Kako se može interpretirati ovaj rezultat? Koeficijenti $c_{\mathbf{k}}$ određuju stepen učešća stanja sa određenim vrednostima impulsa $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ u stanju $\psi(\mathbf{r})$. Pošto su $|c_{\mathbf{k}}|^2$ pozitivni realni brojevi, a njihova suma po svim mogućim vrednostima $\mathbf{k}$ je jednaka jedinici (totalnoj verovatnoći, v. naredni odeljak), kvadrat modula od $c_{\mathbf{k}}$ se interpretira kao verovatnoća da se pri merenju impulsa čestice koja se nalazi u stanju $\psi(\mathbf{r})$ dobije vrednost $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$.

3.2 Izračunavanje srednjih vrednosti fizičkih veličina

3.2.1 Srednja vrednost rezultata merenja, srednje kvadratno odstupanje i standardna devijacija

Neka je merenje veličine x izvršeno N puta, pri čemu je dobijen skup od N rezultata merenja u okviru kojeg se pojavljuje n različitih vrednosti ($n \leq N$). Označimo sa x_i ($i = 1, 2, ..., n$) različite vrednosti iz skupa rezultata, a sa N_i brojeve pojavljivanja (frekvencije) tih vrednosti u skupu. Tada se na osnovu rezultata merenja *srednja vrednost* veličine x određuje kao

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{n} N_i x_i = \sum_{i=1}^{n} \frac{N_i}{N} x_i, \tag{3.37}$$

gde je $N_1 + N_2 + \cdots + N_n = N$ broj izvršenih merenja. Količnici N_i/N se zovu *relativne frekvencije* izmerenih vrednosti x_i.

U graničnom slučaju $N \to \infty$ relativne frekvencije N_i/N prelaze u *verovatnoće* $\mathcal{P}_i$ dobijanja vrednosti x_i. Pošto za relativne frekvencije važi $0 \leq N_i/N \leq 1$ i $\sum_{i=1}^{n} N_i/N = 1$, verovatnoće $\mathcal{P}_i$ su realni brojevi iz intervala $[0, 1]$, a njihova suma po svim mogućim vrednostima merene veličine jednaka je jedinici, tj.

$$0 \leq \mathcal{P}_i \leq 1, \quad \sum_{i=1}^{n} \mathcal{P}_i = 1. \tag{3.38}$$

Izraz za srednju vrednost (3.37) u graničnom slučaju $N \to \infty$ postaje

$$\langle x \rangle = \sum_{i=1}^{n} \mathcal{P}_i x_i. \tag{3.39}$$

Ukoliko je skup mogućih vrednosti merenja veličine x neprebrojiv, npr. ako je to neki interval $[a, b]$ iz skupa realnih brojeva, umesto verovatnoća $\mathcal{P}_i$ dobijanja pojedinačnih vrednosti x_i uvodi se *gustina verovatnoće* $\rho(x) = \mathrm{d}\mathcal{P}/\mathrm{d}x$. Njen integral po skupu mogućih vrednosti jednak je jedinici, tj.

$$\int_a^b \rho(x)\,\mathrm{d}x = \int \mathrm{d}\mathcal{P} = 1, \tag{3.40}$$

a formula za srednju vrednost se tada transformiše u oblik

$$\langle x\rangle = \int_a^b \rho(x)x\,\mathrm{d}x. \tag{3.41}$$

Napomenimo da ako je neka veličina y funkcija merene veličine x, tj. $y = f(x)$, onda merenje ovih dvaju veličina nije nezavisno. Kao posledica toga, verovatnoće da se pri merenju veličina x i y dobiju vrednosti x_i, odnosno $y_i = f(x_i)$, biće jednake. Odavde sledi da se izrazi za srednju vrednost (3.39) i (3.41) mogu uopštiti na oblik

$$\langle f(x)\rangle = \sum_{i=1}^{n} \mathcal{P}_i f(x_i), \tag{3.42}$$

odnosno

$$\langle f(x)\rangle = \int \rho(x)f(x)\,\mathrm{d}x. \tag{3.43}$$

Pored srednje vrednosti, važan podatak o raspodeli rezultata merenja neke veličine je srednje kvadratno odstupanje, odnosno standardna devijacija. Uočimo prvo da je srednja vrednost odstupanja merene veličine od njene srednje vrednosti uvek jednaka nuli. Npr. u slučaju prebrojivog skupa rezultata merenja, koristeći formulu (3.42) i činjenicu da je $\sum_{i=1}^{n} \mathcal{P}_i = 1$, sledi

$$\langle (x - \langle x\rangle)\rangle = \sum_{i=1}^{n} \mathcal{P}_i(x_i - \langle x\rangle) = \sum_{i=1}^{n} \mathcal{P}_i x_i - \langle x\rangle \sum_{i=1}^{n} \mathcal{P}_i = \langle x\rangle - \langle x\rangle = 0. \tag{3.44}$$

Isto se dobija i za neprebrojiv skup rezultata pomoću formule (3.43) i uslova $\int \rho(x)\,\mathrm{d}x = 1$. Očigledno, odstupanja izmerenih vrednosti (pozitivna i negativna) se u formuli za srednju vrednost međusobno kompenzuju. Da bi se ova kompenzacija izbegla, umesto srednje vrednosti odstupanja računa se *srednje kvadratno odstupanje* (disperzija)

$$(\Delta x)^2 = \sum_{i=1}^{n} \mathcal{P}_i(x_i - \langle x\rangle)^2. \tag{3.45}$$

Ako je skup mogućih vrednosti merenja neprebrojiv imaćemo

$$(\Delta x)^2 = \int \rho(x)(x - \langle x\rangle)^2\,\mathrm{d}x. \tag{3.46}$$

U opštem slučaju možemo pisati

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle. \tag{3.47}$$

Dodajmo da se srednje kvadratno odstupanje takođe može predstaviti kao razlika srednje vrednosti kvadrata i kvadrata srednje vrednosti merene veličine. Naime

$$\begin{aligned}(\Delta x)^2 &= \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \rangle \\ &= \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle^2 + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2.\end{aligned} \tag{3.48}$$

Konačno, *standardna devijacija* se definiše kao kvadratni koren iz srednjeg kvadratnog odstupanja

$$\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}. \tag{3.49}$$

Ova veličina se u kvantnoj mehanici koristi kao mera za neodređenost fizičke veličine.

Pošto verovatnoća dobijanja određene vrednosti fizičke veličine pri njenom merenju zavisi od stanja ψ u kome se kvantni sistem nalazi neposredno pre merenja, jasno je da će i srednja (očekivana) vrednost kao i neodređenost te veličine zavisiti od stanja ψ.

3.2.2 Izračunavanje srednje vrednosti koordinate i veličina koje su funkcije koordinate

Neka je stanje čestice u nekom trenutku opisano talasnom funkcijom $\psi(\mathbf{r})$. Tada je prema definiciji (3.23) gustina verovatnoće nalaženja čestice u tački prostora određenoj vektorom položaja $\mathbf{r}$

$$\rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 \equiv \psi^*(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r}). \tag{3.50}$$

Srednja vrednost vektora položaja $\mathbf{r}$ čestice u stanju ψ se neposredno dobija koristeći ovaj rezultat i formulu (3.41)

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \rho(\mathbf{r})\,\mathbf{r}\,\mathrm{d}V = \int \psi^*(\mathbf{r})\,\mathbf{r}\,\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V. \tag{3.51}$$

Napomenimo da, iako je redosled ovde irelevantan, položaj veličine $\mathbf{r}$ između funkcija ψ^* i ψ u poslednjem integralu izabran je, kako ćemo u nastavku videti, radi ujednačenog zapisa izraza za srednju vrednost proizvoljne fizičke veličine.

Razlaganjem vektora položaja čestice $\mathbf{r}$ na komponente x, y, z u pravouglom koordinatnom sistemu, njegova srednja vrednost se može napisati u obliku $\langle \mathbf{r} \rangle = \langle x \rangle\,\mathbf{e}_x + \langle y \rangle\,\mathbf{e}_y + \langle z \rangle\,\mathbf{e}_z$, gde su

$$\langle x \rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r})\,x\,\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V, \quad \langle y \rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r})\,y\,\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V, \quad \langle z \rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r})\,z\,\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V \tag{3.52}$$

srednje vrednosti komponenti vektora položaja u datom stanju $\psi(\mathbf{r})$.

Da bismo odredili srednju vrednost fizičke veličine koja se može izraziti kao realna funkcija koordinate $f(\mathbf{r})$, iskoristićemo činjenicu da se merenje te veličine može svesti na merenje položaja čestice $\mathbf{r}$. Prema tome, gustina verovatnoće da ta funkcija ima vrednost $f(\mathbf{r})$ jednaka je gustini verovatnoće nalaženja čestice u tački $\mathbf{r}$. Tada, koristeći formulu (3.43), sledi

$$\langle f(\mathbf{r})\rangle = \int \rho(\mathbf{r}) f(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V = \int \psi^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V. \tag{3.53}$$

3.2.3 Izračunavanje srednje vrednosti impulsa

Da bismo došli do izraza za srednju vrednost impulsa čestice u datom stanju ψ, razmotrićemo ponovo česticu u ograničenom delu prostora. U tom slučaju verovatnoća da se pri merenju impulsa dobije određena vrednost $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ iznosi $\mathcal{P}_\mathbf{k} = |c_\mathbf{k}|^2$, gde su $c_\mathbf{k}$ koeficijenti u razvoju talasne funkcije $\psi(\mathbf{r})$ po $\psi_\mathbf{k}(\mathbf{r})$ dati izrazom (3.34). Tada je na osnovu izraza (3.39) srednja vrednost impulsa pri merenju u stanju ψ

$$\langle \mathbf{p}\rangle = \sum_\mathbf{k} |c_\mathbf{k}|^2 \hbar\mathbf{k} = \hbar \sum_\mathbf{k} c_\mathbf{k}^*\,\mathbf{k}\,c_\mathbf{k}. \tag{3.54}$$

Ako se koeficijenti $c_\mathbf{k}^*$ i $c_\mathbf{k}$ u ovoj formuli zamene njihovim eksplicitnim izrazima, a onda primeni transformacija

$$\mathbf{k}\,\psi_\mathbf{k}^*(\mathbf{r}) = \mathbf{k}\,A\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = i\nabla\left(A\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right) = i\nabla\psi_\mathbf{k}^*(\mathbf{r}), \tag{3.55}$$

gde je $\nabla = \mathbf{e}_x\partial/\partial x + \mathbf{e}_y\partial/\partial y + \mathbf{e}_z\partial/\partial z$ nabla operator, dobija se

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p}\rangle &= \hbar \sum_\mathbf{k} \int_V \psi_\mathbf{k}(\mathbf{r}')\,\psi^*(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}V'\,\mathbf{k} \int_V \psi_\mathbf{k}^*(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V \\ &= i\hbar \sum_\mathbf{k} \int_V \psi_\mathbf{k}(\mathbf{r}')\,\psi^*(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}V' \int_V (\nabla\psi_\mathbf{k}^*(\mathbf{r}))\,\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V.\end{aligned} \tag{3.56}$$

Predstavljajući vektore $\mathbf{r}$ i ∇ u pravouglom koordinatnom sistemu, te primenjujući parcijalnu integraciju i periodične granične uslove (3.26) na funkcije ψ i $\psi_\mathbf{k}$ unutar kocke stranica L, poslednji integral u izrazu (3.56) se transformiše na sledeći način

$$\begin{aligned}\int_V \psi(\mathbf{r})\,\nabla\psi_\mathbf{k}^*(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V &\equiv \int_0^L\!\!\int_0^L\!\!\int_0^L \psi(x,y,z)\left(\frac{\partial\psi_\mathbf{k}^*}{\partial x}\,\mathbf{e}_x + \frac{\partial\psi_\mathbf{k}^*}{\partial y}\,\mathbf{e}_y + \frac{\partial\psi_\mathbf{k}^*}{\partial z}\,\mathbf{e}_z\right)\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z \\ &= \int_0^L\!\!\int_0^L \mathrm{d}y\,\mathrm{d}z \int_0^L \psi(x,y,z)\frac{\partial\psi_\mathbf{k}^*}{\partial x}\,\mathrm{d}x\,\mathbf{e}_x \;+\; \text{članovi uz ortove } \mathbf{e}_y \text{ i } \mathbf{e}_z \\ &= \int_0^L\!\!\int_0^L \mathrm{d}y\,\mathrm{d}z\left[\psi(x,y,z)\,\psi_\mathbf{k}^*(x,y,z)\Big|_{x=0}^{x=L} - \int_0^L \psi_\mathbf{k}^*(x,y,z)\frac{\partial\psi}{\partial x}\,\mathrm{d}x\right]\mathbf{e}_x + \cdots \\ &= -\int_V \psi_\mathbf{k}^*(\mathbf{r})\,\nabla\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V.\end{aligned} \tag{3.57}$$

Koristeći ovaj rezultat, izraz za srednju vrednost impulsa postaje

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p} \rangle &= -i\hbar \sum_{\mathbf{k}} \int_V \psi^*(\mathbf{r}\,') \, \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}\,') \, \mathrm{d}V' \int_V \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \, \nabla\psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}V \\ &= -i\hbar \int_V \int_V \psi^*(\mathbf{r}\,') \left(\sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \, \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \right) \nabla\psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}V \mathrm{d}V'.\end{aligned}$$

Pokazaćemo da je suma po $\mathbf{k}$ u zagradi jednaka $\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$. Pretpostavimo da se delta funkcija može razviti po funkcijama $\psi_{\mathbf{k}}$ na sledeći način

$$\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \, \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'). \tag{3.58}$$

Koeficijenti u razvoju su tada $b_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \int_V \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})\mathrm{d}V' = \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$. Prema tome

$$\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \, \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'). \tag{3.59}$$

Koristeći ovu relaciju, konačno imamo

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p} \rangle &= -i\hbar \int_V \int_V \psi^*(\mathbf{r}\,') \, \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \, \nabla\psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}V \mathrm{d}V' \\ &= \int_V \psi^*(\mathbf{r}) (-i\hbar\nabla) \psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}V.\end{aligned} \tag{3.60}$$

Poslednja formula zadržava svoj oblik i u graničnom slučaju kada $L \to \infty$, tj. važi i za kretanje čestice u neograničenom prostoru.

Razlaganjem impulsa čestice $\mathbf{p}$ na komponente p_x, p_y, p_z u pravouglom koordinatnom sistemu, njegova srednja vrednost se može napisati u obliku $\langle \mathbf{p} \rangle = \langle p_x \rangle \mathbf{e}_x + \langle p_y \rangle \mathbf{e}_y + \langle p_z \rangle \mathbf{e}_z$, gde su

$$\langle p_x \rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}V, \tag{3.61}$$

$$\langle p_y \rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}V, \tag{3.62}$$

$$\langle p_z \rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}V \tag{3.63}$$

srednje vrednosti komponenti impulsa u datom stanju $\psi(\mathbf{r})$. Parcijalni izvodi koji se javljaju u ovim izrazima su komponente nabla operatora duž koordinatnih osa. Napomenimo da se izrazi (3.61), (3.62), (3.63) takođe mogu dobiti tako što se izraz (3.54) razloži na komponente, a onda se za svaku komponentu sprovede analogan postupak kao za ceo impuls. (Npr. iz $\langle p_x \rangle = \sum_{\mathbf{k}} |c_{\mathbf{k}}|^2 \hbar k_x$ sledi izraz (3.61).)

3.2.4 Izračunavanje srednje vrednosti funkcije impulsa

Neka je $g(\mathbf{p})$ neprekidna i diferencijabilna realna funkcija impulsa čestice. Da bismo odredili srednju vrednost ove funkcije u proizvoljnom stanju $\psi(\mathbf{r})$, razvićemo je u stepeni red po komponentama impulsa: $g(\mathbf{p}) \equiv g(p_x, p_y, p_z) = \sum_l \sum_m \sum_n a_{lmn}\, p_x^l\, p_y^m p_z^n$. Pošto se "merenje" vrednosti izraza $p_x^l\, p_y^m p_z^n$ svodi na merenje samog impulsa, verovatnoća da ovaj izraz ima određenu vrednost $(\hbar k_x)^l\,(\hbar k_y)^m\,(\hbar k_z)^n$ jednaka je verovatnoći da impuls $\mathbf{p}$ ima određenu vrednost $\hbar\mathbf{k}$, dakle $\mathcal{P}_\mathbf{k} = |c_\mathbf{k}|^2$. Na osnovu toga možemo pisati

$$\langle p_x^l\, p_y^m p_z^n\rangle = \sum_\mathbf{k} |c_\mathbf{k}|^2 (\hbar k_x)^l (\hbar k_y)^m (\hbar k_z)^n = \hbar^{l+m+n} \sum_\mathbf{k} c_\mathbf{k}^*\, k_x^l\, k_y^m k_z^n c_\mathbf{k}. \tag{3.64}$$

Polazeći od ovog izraza, analognim postupkom kao pri računanju $\langle\mathbf{p}\rangle$ (transformacije tipa (3.54)-(3.60)), dobija se

$$\langle p_x^l\, p_y^m\, p_z^n\rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)^l \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)^m \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)^n \psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V. \tag{3.65}$$

Kako je verovatnoća da izraz $p_x^l\; p_y^m p_z^n$ ima vrednost $(\hbar k_x)^l\,(\hbar k_y)^m\,(\hbar k_z)^n$ jednaka $|c_\mathbf{k}|^2$ za sve vrednosti stepena l, m, n, onda je i verovatnoća da razvoj funkcije $g(\mathbf{p})$ po komponentama impulsa ima vrednost $\sum_l \sum_m \sum_n a_{lmn}\,(\hbar k_x)^l\,(\hbar k_y)^m (\hbar k_z)^n$ takođe jednaka $|c_\mathbf{k}|^2$. Na osnovu toga je

$$\langle g(\mathbf{p})\rangle = \sum_\mathbf{k} |c_\mathbf{k}|^2 \sum_l \sum_m \sum_n a_{lmn}\,(\hbar k_x)^l\,(\hbar k_y)^m (\hbar k_z)^n = \sum_l \sum_m \sum_n a_{lmn} \langle p_x^l\, p_y^m\, p_z^n\rangle. \tag{3.66}$$

Konačno, koristeći rezultat (3.65) i zamenjujući redosled sumiranja i integraljenja, sledi

$$\langle g(\mathbf{p})\rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) \sum_l \sum_m \sum_n a_{lmn} \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)^l \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)^m \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)^n \psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V. \tag{3.67}$$

Pošto diferencijalni izraz koji se pojavljuje između funkcija ψ^* i ψ u izrazu (3.67) ima oblik ekvivalentan razvoju funkcije $g(\mathbf{p})$ u stepeni red po komponentama impulsa, formalno možemo pisati

$$\sum_l \sum_m \sum_n a_{lmn} \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)^l \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)^m \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)^n = g\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \equiv g(-i\hbar\nabla), \tag{3.68}$$

čime se izraz (3.67) svodi na oblik

$$\langle g(\mathbf{p})\rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r})\, g(-i\hbar\nabla)\, \psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V. \tag{3.69}$$

Ovaj izraz predstavlja uopštenje formule za srednju vrednost impulsa (3.60). Naglasimo, međutim, da za razliku od izraza (3.53) koji predstavlja uopštenje formule za srednju vrednost koordinate (3.51), gde je $f(\mathbf{r})$ zaista funkcija koordinate, "funkcija" $g(-i\hbar\nabla)$ ima simboličko značenje i predstavlja diferencijalni izraz (3.68).

3.2.5 Srednja vrednost zbira funkcija koordinate i impulsa. Izračunavanje srednje vrednosti energije čestice

Pretpostavimo da se fizička veličina A može predstaviti kao zbir neke realne funkcije koordinate $f(\mathbf{r})$ i neprekidne i diferencijabilne realne funkcije impulsa $g(\mathbf{p})$, tj.

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = f(\mathbf{r}) + g(\mathbf{p}). \tag{3.70}$$

Pošto je srednja vrednost zbira dvaju ili više merenih veličina jednaka zbiru njihovih srednjih vrednosti, imamo $\langle A \rangle = \langle f(\mathbf{r}) + g(\mathbf{p}) \rangle = \langle f(\mathbf{r}) \rangle + \langle g(\mathbf{p}) \rangle$. Koristeći izraze (3.53) i (3.69) dalje sledi

$$\begin{aligned} \langle f(\mathbf{r}) + g(\mathbf{p}) \rangle = \langle f(\mathbf{r}) \rangle + \langle g(\mathbf{p}) \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}V \\ + \int \psi^*(\mathbf{r}) g(-i\hbar\nabla) \psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}V = \int \psi^*(\mathbf{r}) [f(\mathbf{r}) + g(-i\hbar\nabla)] \psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}V. \end{aligned} \tag{3.71}$$

Prema tome, formula za računanje srednje vrednosti veličine $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ u stanju ψ može se predstaviti u obliku

$$\langle A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla) \psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}V, \tag{3.72}$$

pri čemu je $A(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla)$ simbolički zapis odgovarajućeg diferencijalnog izraza.

Primer za fizičku veličinu ovog tipa je energija čestice koja se kreće pod dejstvom konzervativnih sila. U tom slučaju ukupna energija čestice opisana je Hamiltonovom funkcijom $H(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ koja predstavlja zbir kinetičke i potencijalne energije čestice, tj.

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = E. \tag{3.73}$$

Na osnovu formule (3.72) izraz za srednju vrednost energije čestice u stanju ψ glasi

$$\langle E \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}) H(-i\hbar\nabla, \mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}V = \int \psi^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}V. \tag{3.74}$$

3.3 Operatori fizičkih veličina

3.3.1 Opšti oblik izraza za srednju vrednost

Izraz (3.72) za računanje srednje vrednosti fizičke veličine A tipa (3.70), kao i specijalne slučajeve (3.51), (3.53), (3.60), (3.69) i (3.74), možemo napisati u opštem obliku

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi \, \mathrm{d}V, \tag{3.75}$$

gde je $\hat{A}$ operator koji se dobija zamenom impulsa $\mathbf{p}$ u funkciji $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ operatorom $-i\hbar\nabla$, dakle pridruživanjem $A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \to \hat{A} = A(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla)$. Ovaj operator ćemo zvati

operator fizičke veličine A. Primetimo da integral na desnoj strani izraza (3.75) predstavlja skalarni proizvod funkcije stanja ψ i funkcije koja se dobija delovanjem operatora $\hat{A}$ na to stanje, tj.

$$\langle A \rangle = (\psi, \hat{A}\psi). \tag{3.76}$$

Ispostavlja se da se formula (3.75), odnosno (3.76), može primeniti za računanje srednje vrednosti proizvoljne fizičke veličine A ukoliko znamo kako da toj veličini pridružimo odgovarajući operator $\hat{A}$. O zasnovanosti ovih formula će biti reči pred kraj odeljka 3.4.5.

3.3.2 Osobine operatora koji opisuju fizičke veličine. Opservable

Pre nego što predstavimo pravila pridruživanja operatora fizičkim veličinama, navešćemo opšte uslove koje ti operatori moraju da zadovoljavaju.

Kao prvo, da bi važio princip superpozicije, ovi operatori moraju biti linearni. Drugim rečima, ako je $\hat{A}$ operator koji predstavlja neku fizičku veličinu, a ψ_1 i ψ_2 talasne funkcije dva proizvoljna kvantna stanja posmatranog sistema, onda mora da važi

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2 \quad \forall c_1, c_2 \in \mathbb{C}. \tag{3.77}$$

Dalje, da bi srednje vrednosti fizičkih veličina bile realne, operatori koji su im pridruženi moraju biti ermitski. Da bismo ovo pokazali, pođimo od izraza (3.76). Ako je $\langle A \rangle$ realan broj, imamo $\langle A \rangle = \langle A \rangle^*$, te na osnovu osobine ermitske simetrije skalarnog proizvoda (v. jednakost (2.26)) sledi

$$(\psi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\psi, \psi), \tag{3.78}$$

što je ekvivalentno uslovu $\hat{A}^+ = \hat{A}$ koji zadovoljavaju ermitski operatori (v. izraze (2.60) i (2.61)).

Konačno, da bi računanje verovatnoća dobijanja određenih vrednosti neke fizičke veličine A bilo moguće, neophodno je da skup svojstvenih funkcija pridruženog operatora $\hat{A}$ čini ortonormirani bazis po kome je moguće razviti proizvoljnu talasnu funkciju posmatranog sistema. Ermitske operatore koji imaju ovu osobinu nazivamo *opservablama* (v. odeljak 2.2.5).[8]

Navedeni zahtevi se obično formulišu kao postulat: *Merljive fizičke veličine se u kvantnoj mehanici opisuju operatorima iz skupa opservabli koji deluju u prostoru stanja kvantnog sistema.*

[8] Podskup ermitskih operatora sa ovom osobinom (tj. skup opservabli) u okviru skupa svih ermitskih operatora koji deluju u nekom Hilbertovom prostoru nije moguće precizno definisati. Pokazalo se, međutim, da svi ermitski operatori koji se u kvantnoj mehanici koriste za opis merljivih fizičkih veličina jesu opservable. Iz tog razloga se često ovaj uslov zanemaruje i uzima da se skup opservabli nekog kvantnog sistema poklapa sa skupom svih ermitskih operatora koji deluju u prostoru stanja tog sistema.

3.3.3 Operatori koordinate i impulsa. Multiplikativni i diferencijalni operatori

Iz izraza (3.51) i (3.60) za srednje vrednosti koordinate i impulsa neposredno sledi da su operatori koordinate odnosno impulsa

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}, \tag{3.79}$$

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \tag{3.80}$$

Uočimo da je operator koordinate ustvari sama promenljiva $\mathbf{r}$. Tačnije rečeno, ovde se radi o uređenoj trojci operatora $\hat{\mathbf{r}} \equiv (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ (vektorskom operatoru), čije su komponente operatori koji su pridruženi komponentama vektora položaja $\mathbf{r}$. Na osnovu izraza (3.52) imamo

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z. \tag{3.81}$$

Delovanje ovih operatora na talasnu funkciju čestice svodi se na množenje odgovarajućih komponenti vektora položaja sa tom funkcijom. Operatore koji na taj način deluju na talasne funkcije nazivamo *multiplikativnim operatorima*. Prema tome, operator koordinate, njegove komponente, kao i njihove funkcije spadaju u multiplikativne operatore.

Operator impulsa je s druge strane *diferencijalni operator*. I ovde možemo govoriti o uređenoj trojci $\hat{\mathbf{p}} \equiv (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$, gde su na osnovu izraza (3.61), (3.62), (3.63)

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \tag{3.82}$$

operatori pridruženi komponentama vektora impulsa $\mathbf{p}$.

Operatori koordinate i impulsa su očigledno linearni operatori (množenje i diferenciranje su linearne operacije). Na osnovu transformacije

$$(\psi, \hat{\mathbf{r}}\varphi) = \int \psi^*(\mathbf{r})\,\mathbf{r}\,\varphi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V = \int (\mathbf{r}\psi(\mathbf{r}))^*\varphi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V = (\hat{\mathbf{r}}\psi, \varphi), \tag{3.83}$$

koja važi za bilo koja dva stanja čestice ψ i φ, sledi da je operator koordinate ermitski. Koristeći relaciju $\int \psi^*(\mathbf{r})\nabla\varphi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V = -\int \varphi(\mathbf{r})\nabla\psi^*(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V$ (koja se dokazuje analogno relaciji (3.57)) sledi

$$\begin{aligned}(\psi, \hat{\mathbf{p}}\varphi) &= \int \psi^*(\mathbf{r})\,(-i\hbar\nabla)\,\varphi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V = -i\hbar\int \psi^*(\mathbf{r})\nabla\varphi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V \\ &= i\hbar\int \varphi(\mathbf{r})\,\nabla\psi^*(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V = \int (-i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}))^*\varphi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V = (\hat{\mathbf{p}}\psi, \varphi),\end{aligned} \tag{3.84}$$

tj. operator impulsa je takođe ermitski operator. Uočimo da je prisustvo imaginarne jedinice u operatoru impulsa ključno za ovu osobinu.

Kasnije ćemo videti (odeljak 3.4.8) da skupovi svojstvenih funkcija operatora koordinate i impulsa potpuni, tj. čine svojstvene bazise po kojima je (po svakom od njih) moguće razviti bilo koju talasnu funkciju iz prostora stanja čestice. Prema tome, operatori koordinate i impulsa su opservable.

3.3.4 Pridruživanje operatora fizičkim veličinama. Kvantizacija

Na početku ovog poglavlja smo pokazali kako se fizičkoj veličini A, koja se može predstaviti kao zbir neke realne funkcije koordinate $f(\mathbf{r})$ i neprekidne i diferencijabilne realne funkcije impulsa $g(\mathbf{p})$ (izraz (3.70)), pridružuje operator $\hat{A}$. Koristeći izraze za operatore koordinate i impulsa, (3.79) i (3.80), pravilo pridruživanja se može napisati u obliku

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \to \hat{A} = A(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}). \tag{3.85}$$

Pokazaćemo da je operator $\hat{A}$, koji je ovako pridružen fizičkoj veličini A oblika (3.70), ermitski. Pošto je u ovom slučaju $\hat{A} = f(\hat{\mathbf{r}}) + g(\hat{\mathbf{p}})$, s obzirom da je zbir dva ermitska operatora takođe ermitski operator (v. relaciju 2.57), za to je dovoljno pokazati da su $f(\hat{\mathbf{r}})$ i $g(\hat{\mathbf{p}})$ ermitski operatori.

Pošto je $f(\hat{\mathbf{r}})$ realan multiplikativni operator, sledi da je on ermitski. Ovo se pokazuje analogno kao za operator $\hat{\mathbf{r}}$, tj. uopštavajući relaciju (3.83) na slučaj proizvoljne realne funkcije koordinate $f(\mathbf{r})$

$$(\psi, f(\hat{\mathbf{r}})\varphi) = \int \psi^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r})\, \varphi(\mathbf{r})\, \mathrm{d}V = \int [f(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})]^* \varphi(\mathbf{r})\, \mathrm{d}V = (f(\hat{\mathbf{r}})\psi, \varphi). \tag{3.86}$$

Da bismo pokazali da je i $g(\hat{\mathbf{p}})$ ermitski operator, podsetimo se da ovaj operatorski izraz ustvari predstavlja razvoj funkcije $g(\mathbf{p})$ u red po komponentama impulsa koje su zatim zamenjene odgovarajućim operatorima (v. odeljak 3.2.4). Prema tome, $g(\hat{\mathbf{p}})$ se može predstaviti u obliku (3.68), odnosno kao

$$g(\hat{\mathbf{p}}) = \sum_l \sum_m \sum_n a_{lmn}\, \hat{p}_x^{\,l} \hat{p}_y^{\,m} \hat{p}_z^{\,n}, \tag{3.87}$$

gde su a_{lmn} realni koeficijenti. Na kraju ovog odeljka ćemo predstaviti pravilo prema kome proizvod ermitskih operatora koji međusobno komutiraju takođe mora biti ermitski operator. Ove uslove zadovoljavaju operatori komponenti impulsa (njihovo komutiranje ćemo pokazati u narednom odeljku), odakle proizilazi da je $\hat{p}_x^{\,l} \hat{p}_y^{\,m} \hat{p}_z^{\,n}$ ermitski operator. Uzimajući u obzir ovaj rezultat i osobine (2.55) i (2.57), dobijamo

$$[g(\hat{\mathbf{p}})]^+ = \sum_l \sum_m \sum_n a_{lmn}^*\, \hat{p}_x^{\,l} \hat{p}_y^{\,m} \hat{p}_z^{\,n}. \tag{3.88}$$

Konačno, posto su koeficijenti a_{lmn} realni, sledi $[g(\hat{\mathbf{p}})]^+ = g(\hat{\mathbf{p}})$, tj. $g(\hat{\mathbf{p}})$ je ermitski operator.

Funkcijama tipa (3.70), očigledno, nije moguće predstaviti sve fizičke veličine koje se izvode iz komponenti koordinate i impulsa kao osnovnih dinamičkih promenljivih. Postavlja se pitanje da li je pridruživanje operatora fizičkim veličinama po pravilu (3.85) korektno u opštem slučaju. U nastavku ćemo videti da ovo pravilo ne garantuje da operator koji je pridružen fizičkoj veličini koja je funkcija koordinate i impulsa oblika različitog od (3.70) obavezno bude ermitski.

Primer za to je izraz

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \equiv xp_x + yp_y + zp_z. \tag{3.89}$$

U klasičnoj mehanici on je identičan izrazu

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \equiv p_x x + p_y y + p_z z. \tag{3.90}$$

Ako se, međutim, promenljive $\mathbf{r}$ i $\mathbf{p}$ u izrazima (3.89) i (3.90) zamene operatorima $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$, pridruženi operatori neće biti identični

$$\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \neq \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}}, \tag{3.91}$$

što je posledica nekomutiranja komponenti operatora $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$, o čemu će biti reči u odeljku 3.3.5. Prema tome, ako bismo koristili pravilo (3.85), pridruživanje operatora veličini $\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$ ne bi bilo jednoznačno. Osim toga, s obzirom da je

$$\begin{aligned}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^+ &= (\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z)^+ = \hat{p}_x^+\hat{x}^+ + \hat{p}_y^+\hat{y}^+ + \hat{p}_z^+\hat{z}^+ \\ &= \hat{p}_x\hat{x} + \hat{p}_y\hat{y} + \hat{p}_z\hat{z} = \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}},\end{aligned} \tag{3.92}$$

sledi da operatori $\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ i $\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}}$ nisu ermitski. Navedeni problemi se prevazilaze ako proizvodu promenljivih $\mathbf{r}$ i $\mathbf{p}$ pridružimo simetrizovani proizvod odgovarajućih operatora, tj.

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \to \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}}). \tag{3.93}$$

Koristeći relaciju (3.92), lako se pokazuje da je operator na desnoj strani ermitski.

Na osnovu ovog primera možemo zaključiti da ukoliko izraz za fizičku veličinu sadrži proizvod promenljivih čiji operatori ne komutiraju, onda pridruživanje operatora toj veličini koristeći pravilo (3.85) može imati za posledicu nejednoznačnost i neermitski karakter pridruženog operatora. Prema tome, da bi se dobio operator fizičke veličine koji ispunjava sve potrebne uslove, pri pridruživanju (3.85) je neophodno voditi računa o mogućoj nekomutativnosti faktora u izrazu za taj operator i, kada je to potrebno, primeniti odgovarajuće korekcije. U tom cilju navešćemo nekoliko uslova koji obezbeđuju ermitski karakter izraza koji sadrže proizvod ermitskih operatora:

(i) Proizvod ermitskih operatora $\hat{A}$ i $\hat{B}$ je ermitski operator ako i samo ako operatori $\hat{A}$ i $\hat{B}$ *komutiraju* ($[\hat{A}, \hat{B}] = 0$).

(ii) Ako su $\hat{A}$ i $\hat{B}$ ermitski operatori, tada su simetrizovani i antisimetrizovani proizvod ovih operatora

$$\frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}) \quad \text{i} \quad i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \tag{3.94}$$

takođe *ermitski* operatori.

(iii) Ako su $\hat{A}$ i $\hat{B}$ ermitski operatori, onda je opštem slučaju

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}, \tag{3.95}$$

pri čemu je $\hat{C}$ ermitski operator.

Da bismo pokazali dovoljnost pretpostavke u iskazu (i), uočimo da za bilo koja dva ermitska operatora $\hat{A}$ i $\hat{B}$ važi $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}\hat{A}$ (v. pravilo (2.56)). Prema tome, ako operatori $\hat{A}$ i $\hat{B}$ komutiraju, tj. ako je $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, sledi $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{A}\hat{B}$, odnosno $\hat{A}\hat{B}$ je ermitski operator. Potrebnost se pokazuje polazeći od suprotnog. Ako ermitski operatori $\hat{A}$ i $\hat{B}$ ne komutiraju, tj. ako je $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$, sledi $(\hat{A}\hat{B})^+ \neq \hat{A}\hat{B}$, odnosno $\hat{A}\hat{B}$ nije ermitski operator.

Ermitski karakter izraza (3.94) u iskazu (ii) se dokazuje koristeći osobine operacije adjungovanja (v. relacije (2.55)-(2.57)):

$$\left[\frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})\right]^+ = \frac{1}{2}(\hat{B}^+\hat{A}^+ + \hat{A}^+\hat{B}^+) = \frac{1}{2}(\hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}) = \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}), \tag{3.96}$$

$$[i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})]^+ = -i(\hat{B}^+\hat{A}^+ - \hat{A}^+\hat{B}^+) = -i(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}) = i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}). \tag{3.97}$$

Osobina (iii) sledi direktno iz prethodnog iskaza ako uočimo da je operator $-\hat{C}$ jednak drugom od izraza (3.94).

Uzimajući u obzir navedene osobine, pravilo pridruživanja operatora fizičkim veličinama koje su funkcije koordinate i impulsa može se u opštem slučaju iskazati na sledeći način: *Opservabla $\hat{A}$ koja opisuje fizičku veličinu A, koja je funkcija koordinate* $\mathbf{r}$ *i impulsa* $\mathbf{p}$*, dobija se zamenjujući promenljive* $\mathbf{r}$ *i* $\mathbf{p}$ *u pogodno simetrizovanom izrazu za A operatorima* $\hat{\mathbf{r}}$ *i* $\hat{\mathbf{p}}$.

Pridruživanje opservabli fizičkim veličinama, koje se tradicionalno tretiraju kao klasične varijable, se obično naziva *kvantizacija* ovih poslednjih. Uočimo da se ovaj postupak u suštini oslanja na princip korespondencije (v. odeljak 1.2.4) kojim se uspostavlja veza između veličina u kvantnom i klasičnom opisu.

3.3.5 Komutacione relacije između komponenti koordinate i impulsa. Osnovni operatori u kvantnoj mehanici

Kao što smo videli u odeljku 3.3.3, koordinati i impulsu čestice pridružujemo multiplikativni operator $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$, odnosno diferencijalni operator $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. Ovi operatori su, analogno odgovarajućim klasičnim veličinama, trokomponentni vektorski izrazi čije komponente su date izrazima (3.81) i (3.82). Pre nego što pređemo na konstrukciju operatora fizičkih veličina izvedenih iz osnovnih dinamičkih promenljivih $\mathbf{r}$ i $\mathbf{p}$, ispitaćemo da li komponente ovih poslednjih međusobno komutiraju.

Operatori komponenti koordinate međusobno komutiraju. Isto važi i za komponente impulsa. Uvedeći oznake $x_1 \equiv x$, $x_2 \equiv y$, $x_3 \equiv z$ i $\hat{p}_j = -i\hbar\,\partial/\partial x_j$, možemo pisati

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad i, j = 1, 2, 3. \tag{3.98}$$

Komutiranje komponenti koordinate neposredno sledi iz multiplikativnog karaktera odgovarajućih operatora, dok je komutiranje komponenti impulsa posledica irelevantnosti redosleda parcijanog diferenciranja proizvoljne funkcije $f(\mathbf{r})$ po komponentama koordinate ($\partial^2 f/\partial x_i \partial x_j \equiv \partial^2 f/\partial x_j \partial x_i$).

Odgovarajuće komponente koordinate i impulsa, međutim, ne komutiraju

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad [\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar, \quad [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar. \tag{3.99}$$

Da bismo pokazali prvu od navedenih relacija, ispitaćemo delovanje komutatora $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ (kao operatora) na proizvoljnu funkciju $f(x)$. Imamo

$$\begin{aligned}[\hat{x}, \hat{p}_x]f(x) &= \hat{x}\,\hat{p}_x f(x) - \hat{p}_x\,\hat{x} f(x) = x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) f(x) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)(xf(x)) \\ &= -i\hbar\, x\frac{\partial f}{\partial x} + i\hbar f(x) + i\hbar\, x\frac{\partial f}{\partial x} = i\hbar f(x),\end{aligned} \tag{3.100}$$

odakle zbog proizvoljnosti funkcije $f(x)$ sledi izraz u (3.99). Analogno se dokazuju i ostale dve komutacione relacije. Napomenimo radi matematičke korektnosti da bi na desnim stranama ovih izraza ustvari trebalo da stoji $i\hbar\hat{I}$, gde je $\hat{I}$ jedinični operator koji deluje u prostoru stanja čestice. U fizici se, međutim, ovo prećutno podrazumeva i komutacione relacije radi jednostavnosti pišu u obliku (3.99).

Različite komponente koordinate i impulsa, međutim, uvek komutiraju, tj.

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad i \neq j. \tag{3.101}$$

Pokazaćemo ovo na primeru komponenti $\hat{x}$ i $\hat{p}_y$ delujući komutatorom $[\hat{x}, \hat{p}_y]$ na proizvoljnu funkciju $f(x, y)$

$$\begin{aligned}[\hat{x}, \hat{p}_y]f(x,y) &= \hat{x}\,\hat{p}_y f(x,y) - \hat{p}_y\,\hat{x} f(x,y) \\ &= x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right) f(x,y) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)(xf(x,y)) \\ &= -i\hbar\, x\frac{\partial f}{\partial y} + i\hbar\, x\frac{\partial f}{\partial y} = 0.\end{aligned} \tag{3.102}$$

Relacije (3.99) i (3.101) se konačno mogu napisati u jedinstvenom obliku

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}, \quad i = 1, 2, 3. \tag{3.103}$$

Od fizičkih veličina izvedenih iz osnovnih dinamičkih promenljivih razmotrićemo prvo moment impulsa čestice koji je definisan kao $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Koristeći pravilo (3.85) sledi da operator momenta impulsa čestice ima oblik

$$\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\,(\mathbf{r} \times \nabla). \tag{3.104}$$

U ovom izrazu se, međutim, pojavljuje vektorski proizvod operatora $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$ i, da bismo bili sigurni u njegovu korektnost, potrebno je konsultovati komutacione relacije između komponenti operatora koordinate i impulsa u pravouglom koordinatnom sistemu. Komponente momenta impulsa u tom sistemu, kao što je poznato, imaju oblik $l_x = yp_z - zp_y$, $l_y = zp_x - xp_z$, $l_z = xp_y - yp_x$. Pošto se u ovim izrazima pojavljuju isključivo proizvodi različitih komponenti koordinate i impulsa, a njihovi

operatori prema (3.101) međusobno komutiraju, na osnovu uslova (i) iz prethodnog odeljka sledi da će se primenom pravila (3.85) dobiti ermitski operatori. Prema tome, operatori komponenti momenta impulsa čestice u pravougaonom koordinatnom sistemu glase

$$\hat{l}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \tag{3.105}$$

$$\hat{l}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \tag{3.106}$$

$$\hat{l}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right), \tag{3.107}$$

a odatle sledi da je i izraz (3.104) korektan.

Druga značajna fizička veličina čiji ćemo operator odrediti je energija čestice koja se kreće pod dejstvom konzervativnih sila. Kao što je navedeno u odeljku 3.2.5, ukupna energija čestice je u tom slučaju opisana Hamiltonovom funkcijom $H(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ koja je oblika (3.73), tj. predstavlja zbir kinetičke i potencijalne energije čestice. Pošto se radi o fizičkoj veličini koja je funkcija koordinate i impulsa oblika (3.70), sledi da je pravilo (3.85) i ovde direktno primenljivo, te operator energije, tzv. *hamiltonijan*, u ovom slučaju ima oblik (v. takođe izraz za srednju vrednost (3.74))

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}), \tag{3.108}$$

gde je $\Delta \equiv \nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ Laplasov operator (laplasijan). Pomenimo da se potencijalna energija u kvantnoj mehanici obično naziva "potencijal".[9]

3.4 Svojstvena stanja i spektri opservabli

3.4.1 Uslov da fizička veličina ima određenu vrednost. Svojstveni problem opservable

U odeljku 3.2.1 smo pokazali kako se srednja vrednost fizičke veličine A u datom stanju ψ izračunava koristeći operator te veličine $\hat{A}$ (formula (3.75) ili (3.76)). Ako uvedemo operator odstupanja veličine A od njene srednje vrednosti kao $\hat{A} - \langle A\rangle$, na isti način se može izračunati i srednje kvadratno odstupanje te veličine u stanju ψ

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle = \int \psi^*(\hat{A} - \langle A\rangle)^2\psi \,\mathrm{d}V = (\psi, (\hat{A} - \langle A\rangle)^2\psi). \tag{3.109}$$

S obzirom da je operator odstupanja $\hat{A} - \langle A\rangle$ ermitski, skalarni proizvod na kraju poslednjeg izraza se može napisati u obliku $((\hat{A} - \langle A\rangle)\psi, (\hat{A} - \langle A\rangle)\psi)$, a ovo predstavlja kvadrat norme funkcije $(\hat{A} - \langle A\rangle)\psi$. Prema tome

$$(\Delta A)^2 = \|(\hat{A} - \langle A\rangle)\psi\|^2. \tag{3.110}$$

[9] Misli se na potencijal sila, što je sinonim za potencijalnu energiju, i koji treba razlikovati od potencijala fizičkog polja.

Pošto srednje kvadratno odstupanje rezultata merenja fizičke veličine A, a time i njena neodređenost ΔA, presudno zavise od stanja ψ u kojem se kvantni sistem nalazi neposredno pre merenja, može se postaviti pitanje postoje li stanja u kojima veličina A ima tačno određenu vrednost, tj. u kojima je $\Delta A = 0$. Koristeći formulu (3.110) i činjenicu da se u slučaju nulte neodređenosti srednja vrednost veličine A poklapa sa vrednošću a dobijenom merenjem, tj. $\langle A \rangle = a$, uslov $\Delta A = 0$ daje $\|(\hat{A} - a)\psi\| = 0$. Pošto norma neke funkcije može biti nula jedino ako je sama funkcija jednaka nuli (v. osobinu skalarnog proizvoda (2.29)) odavde sledi $(\hat{A} - a)\psi = 0$, odnosno

$$\hat{A}\psi = a\psi. \tag{3.111}$$

Poslednja jednačina predstavlja svojstveni problem operatora $\hat{A}$, a vrednosti a i odgovarajuće funkcije ψ koje su rešenja ovog problema nazivaju se *svojstvene vrednosti*, odnosno *svojstvene funkcije* operatora $\hat{A}$. Prema tome, ako fizička veličina A merena u stanju ψ ima tačno određenu vrednost a, onda je ta vrednost neka svojstvena vrednost pridruženog operatora $\hat{A}$, a talasna funkcija koja opisuje to stanje je odgovarajuća svojstvena funkcija ovog operatora.

Pokazaćemo da poslednji iskaz predstavlja dovoljan uslov da fizička veličina ima određenu vrednost. Neka se kvantni sistem nalazi u stanju koje je neko svojstveno stanje fizičke veličine A, tj. talasna funkcija ψ koja opisuje to stanje je rešenje svojstvene jednačine (3.111). Tada je

$$\langle A \rangle = (\psi, \hat{A}\,\psi) = (\psi, a\,\psi) = a\,(\psi, \psi) = a, \tag{3.112}$$

odakle sledi

$$\Delta A = \|(\hat{A} - \langle A \rangle)\psi\| = \|(a - a)\psi\| = 0, \tag{3.113}$$

tj. fizička veličina A ima tačno određenu vrednost, i to je upravo svojstvena vrednost pridruženog operatora $\hat{A}$ koja odgovara svojstvenom stanju ψ.

Ovde ćemo se podsetiti teoreme iz prethodne glave, navedene na početku odeljka 2.2.5, koja kaže da su svojstvene vrednosti ermitskog operatora uvek realne. Kao što smo na tom mestu već napomenuli, ova osobina je od sušinstog značaja za kvantnu mehaniku pošto su vrednosti koje dobijamo pri merenju fizičkih veličina uvek neki realni brojevi.

Da bi svojstvene funkcije neke opservable ili njihova superpozicija mogle da predstavljaju stanja kvantnog sistema, od svih rešenja svojstvenog problema te opservable treba zadržati samo nenulta, jednoznačna, neprekidna i diferencijabilna rešenja koja zadovoljavaju zadate granične uslove. Uz to, ukoliko same svojstvene funkcije opisuju kvantna stanja, onda one moraju da budu i kvadratno integrabilne po modulu, što se obično obezbeđuje graničnim ili periodičnim uslovima. Ovi uslovi redukuju skup vrednosti fizičke veličine za koje svojstveni problem ima rešenje, tako da skup svojstvenih vrednosti postaje *diskretan* realan niz. Suprotno, ako svojstvene funkcije nisu kvadratno integrabilne, onda odgovarajuće svojstvene vrednosti čine *neprekidan* skup realnih vrednosti u nekom intervalu.

Takođe treba imati na umu da svojstvene vrednosti opservable mogu da budu degenerisane, tj. jednoj svojstvenoj vrednosti može da odgovara više linearno nezavisnih

svojstvenih funkcija (v. odeljak 2.2.4). U tom slučaju, ako ove funkcije opisuju kvantna stanja, fizička veličina ima istu određenu vrednost u svakom od tih stanja ali, takođe, i u stanjima koja su njihova superpozicija.

Skup svih svojstvenih vrednosti nekog operatora se naziva spektar tog operatora (v. odeljak 2.2.4) i, kao što je pomenuto, on može biti diskretan ili neprekidan (kontinualan). Da bi se svojstvene funkcije koje odgovaraju različitim svojstvenim vrednostima razlikovale, obično se uz oznaku funkcije dopisuje odgovarajuća svojstvena vrednost. Npr. ψ_a predstavlja svojstvenu funkciju operatora $\hat{A}$ koja odgovara nedegenerisanoj svojstvenoj vrednosti a. Ako su svojstvene vrednosti degenerisane, da bi se svojstvene funkcije koje odgovaraju istoj svojstvenoj vrednosti razlikovale, potrebno je uvesti dodatni indeks ili neku drugu dodatnu oznaku.

U slučaju diskretnog spektra skup svojstvenih vrednosti je prebrojiv, pa se ove vrednosti mogu obeležiti indeksom koji uzima vrednosti iz nekog prebrojivog skupa brojeva i naziva se *kvantni broj*. Najčešće se u tu svrhu koriste skupovi prirodnih, celih ili polucelih brojeva. Ukoliko su svojstvene vrednosti nedegenerisane, istim kvantnim brojevima se mogu jednoznačno obeležiti i odgovarajuće svojstvene funkcije. Npr. ako je niz nedegenerisanih diskretnih svojstvenih vrednosti a_n, $n = 1, 2, \ldots$ spektar opservable $\hat{A}$, onda n predstavlja kvantni broj, a odgovarajuće svojstvene funkcije ψ_{a_n} se mogu označiti sa ψ_n. Ako su, međutim, svojstvene vrednosti degenerisane, potrebno je uvesti dodatni indeks, odnosno dodatni kvantni broj.

3.4.2 Moguće vrednosti fizičke veličine i promena stanja kao rezultat merenja

Vratimo se sada na glavni rezultat prethodne analize, tj. na zaključak da u stanju koje je opisano svojstvenom funkcijom operatora fizičke veličine ta veličina ima određenu vrednost jednaku odgovarajućoj svojstvenoj vrednosti pridruženog operatora. Razmotrimo kakvo značenje ima ova činjenica sa stanovišta merenja.

- Ako se merenje fizičke veličine A vrši na kvantnom ansamblu koji se sastoji od istovetnih sistema u istom kvantnom stanju (ansambl je, dakle, homogen; v. odeljak 1.4.7) koje je neko svojstveno stanje ψ_a odgovarajuće opservable $\hat{A}$, gornji zaključak znači da će rezultat merenja ove veličine na svim sistemima ansambla biti isti – dobijaće se isključivo vrednost a koja je svojstvena vrednost opservable $\hat{A}$ za svojstveno stanje ψ_a.

- Sa stanovišta pojedinačnog kvantnog sistema isti zaključak bi značio da će rezultat merenja fizičke veličine A u stanju ψ_a, koje je svojstveno stanje odgovarajuće opservable $\hat{A}$, biti *pouzdano* (tj. sa verovatnoćom 1) svojstvena vrednost a te opservable koja odgovara svojstvenom stanju ψ_a.

Postavlja se pitanje šta će biti rezultat merenja fizičke veličine A ako se kvantni sistem ne nalazi ni u jednom od svojstvenih stanja opservable $\hat{A}$. U nastavku, kada budemo proučavali osobine diskretnog i neprekidnog spektra opservabli, videćemo da se srednja vrednost fizičke veličine može izraziti preko sume ili integrala oblika

(3.39), odnosno (3.41), u kojima se pojavljuju isključivo svojstvene vrednosti odgovarajuće opservable. Ovaj rezultat ukazuje na skup mogućih vrednosti fizičke veličine pri njenom merenju u proizvoljnom stanju. Sveukupno eksperimentalno iskustvo potvrđuje sledeće činjenice:

- Ako se kvantni sistem nalazi u stanju opisanom talasnom funkcijom ψ koja nije svojstvena funkcija opservable $\hat{A}$, tada će se pri merenju veličine A u tom stanju dobijati različite vrednosti ali svaka od njih će biti jednaka nekoj od svojstvenih vrednosti ove opservable. Ovakvo merenje je pogodno realizovati opet na homogenom kvantnom ansamblu, tj. uzimajući da su svi sistemi ansambla u istom stanju ψ, koje ovaj put nije svojstveno stanje merene veličine.

- Ako se merenje izvrši na pojedinačnom kvantnom sistemu u stanju koje nije svojstveno stanje merene veličine, rezultat merenja će biti jedna od svojstvenih vrednosti, ali u tom slučaju nije moguće predvideti koja. Može se jedino izračunati verovatnoća dobijanja te ili bilo koje druge svojstvene vrednosti u datom stanju, pri čemu će izračunate verovatnoće biti bliske relativnim frekvencijama pojavljivanja odgovarajućih vrednosti pri merenju na ansamblu.

Navedene činjenice se u sažetom obliku mogu izraziti kao postulat o merenju fizičke veličine: *Jedini mogući rezultat merenja fizičke veličine A je neka od svojstvenih vrednosti odgovarajuće opservable* $\hat{A}$.

Primetimo da je, u svim gore navedenim varijantama merenja, merenje na istom kvantnom sistemu (kao elementu ansambla ili pojedinačno) vršeno samo jednom. Tada se prirodno nameće sledeće pitanje: Ako je merenjem neke fizičke veličine na kvantnom sistemu u proizvoljnom stanju dobijena neka od vrednosti u skladu sa navedenim postulatom, koja vrednost će se dobiti u ponovljenom merenju te veličine na istom sistemu? Odgovor koji potvrđuju svi eksperimetni i posmatranja glasi: *Svako ponovljeno merenje na istom sistemu daće isti rezultat kao u prvom merenju.*[10] Ova činjenica se može interpretirati na sledeći način: Pošto svako ponovljeno merenje pouzdano daje isti rezultat, zaključak je da se sistem nakon prvog izvršenog merenja nalazi u svojstvenom stanju operatora merene veličine. Prema tome, samim procesom merenja sistem je iz prvobitnog proizvoljnog stanja prešao u svojstveno stanje operatora merene fizičke veličine, i to u ono koje odgovara dobijenoj (svojstvenoj) vrednosti. Da bismo ovo bolje razumeli, formalno možemo uzeti da je početno stanje neka superpozicija svojstvenih stanja merene veličine (o čemu će biti reči u odeljcima 3.4.4 i 3.4.6). Procesom merenja se iz ove superpozicije nasumice izdvaja jedno od svojstvenih stanja u koje sistem, nakon izvršenog merenja, prelazi. Ova promena se u literaturi naziva *redukcija talasnog paketa*, *kolaps talasne funkcije* ili *kvantni skok*. U koje će od svojstvenih stanja sistem preći nije moguće unapred odrediti, osim u trivijalnom slučaju kada je početno stanje neko od svojstvenih stanja. U tom slučaju sistem pouzdano ostaje u istom svojstvenom stanju u kojem je bio pre merenja.

[10] Ovde se pretpostavlja da se ponovljeno merenje vrši neposredno nakon prethodnog merenja, čime se isključuje promena stanja između dva meranja zbog evolucije, o čemu će biti reči u sledećoj glavi.

3.4.3 Primeri rešavanja svojstvenog problema operatora fizičkih veličina

Svojstveni problem operatora x-komponente impulsa. Koristeći izraz (3.82) za operator $\hat{p}_x$, njegov svojstveni problem

$$\hat{p}_x \psi(x) = p_x \psi(x) \tag{3.114}$$

se svodi na diferencijalnu jednačinu

$$-i\hbar \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} = p_x \psi(x). \tag{3.115}$$

Transformacijom ove jednačine u oblik $\mathrm{d}\psi/\psi = \frac{i}{\hbar} p_x \,\mathrm{d}x$, a zatim njenim integraljenjem, dobija se $\ln \psi = \frac{i}{\hbar} p_x x + c$, odnosno uz smenu $c = \ln A$

$$\psi(x) = A\, e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}. \tag{3.116}$$

Ako kretanje čestice duž x-ose nije ograničeno, rešenja (3.116) su konačne, jednoznačne i neprekidne funkcije za sve vrednosti p_x koje pripadaju skupu realnih brojeva. Operator $\hat{p}_x$, prema tome, ima neprekidan spektar u intervalu $(-\infty, \infty)$. Pošto svakoj svojstvenoj vrednosti p_x odgovara jedna (do na proizvoljni faktor A) svojstvena funkcija (3.116), spektar ovog operatora je nedegenerisan.

Uočimo da su svojstvene funkcije operatora $\hat{p}_x$ ustvari ravni talasi (v. izraz (3.2) za $t = 0$) sa talasnim vektorom usmerenim u pravcu x-ose. U odeljku (3.1.2) smo uveli ravne talase da bismo opisali slobodno kretanje čestice sa određenom vrednošću impulsa. U tom slučaju i energija čestice ima određenu vrednost $E = p_x^2/2m$, što ukazuje da su funkcije (3.116) istovremeno i svojstvene funkcije energije. Da bismo to pokazali, posmatrajmo Hamiltonijan koji opisuje ovaj jednodimenzioni problem

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}. \tag{3.117}$$

Odgovarajući svojstveni problem $\hat{H}\psi = E\psi$ se svodi na diferencijalnu jednačinu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\,\psi(x), \tag{3.118}$$

koja se smenom $E = \hbar^2 k_x^2/2m$ transformiše u oblik $\mathrm{d}^2\psi/\mathrm{d}x^2 + k_x^2\psi(x) = 0$. Poznato je da su partikularna rešenja ove diferencijalne jednačine $e^{\pm i k_x x}$, tj. ravni talasi (3.116) sa impulsima $\pm\hbar k_x$, što bi odgovaralo kretanju čestice duž x-ose u pozitivnom i u negativnom smeru. Kako oba rešenja odgovaraju istoj vrednosti energije, sledi da je energijski spektar, za razliku od spektra operatora $\hat{p}_x$, dvostruko degenerisan.

Podsetimo se ovom prilikom da ravni talasi nisu kvadratno integrabilne funkcije (v. izraz (3.24)) te, iz tog razloga, ne mogu da opisuju prava kvantna stanja. Realna čestica se, prema tome, ne može naći u stanju koje bi bilo opisano ravnim talasom, odakle sledi da se kretanju slobodne čestice ne može pripisati tačno određena vrednost impulsa (odeljak 3.1.5), a time ni energije. U odeljku 3.4.6 ćemo videti da ovu osobinu imaju sve fizičke veličine čije opservable imaju neprekidan spektar.

Svojstveni problem operatora z-komponente momenta impulsa. Operator $\hat{l}_z$ je u Dekartovim koordinatama dat izrazom (3.107). Za rešavanje svojstvenog problema ovog operatora, međutim, pogodnije je koristiti odgovarajući izraz u polarnim (ili sfernim) koordinatama

$$\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \tag{3.119}$$

U tom slučaju svojstvene funkcije Φ ovog operatora, kao i sam operator, zavise isključivo od ugla φ, pa se njegov svojstveni problem

$$\hat{l}_z \, \Phi(\varphi) = l_z \, \Phi(\varphi). \tag{3.120}$$

može napisati u obliku

$$-i\hbar \frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}\varphi} = l_z \, \Phi(\varphi). \tag{3.121}$$

Analognim postupkom kao u prethodnom primeru dobija se da je rešenje oblika

$$\Phi(\varphi) = A \, e^{\frac{i}{\hbar} l_z \varphi}. \tag{3.122}$$

Pošto se vrednosti promenljive φ nalaze u intervalu $(0, 2\pi)$, za razliku od prethodnog primera, ovde je radi jednoznačnosti talasne funkcije neophodno uzeti u obzir uslov periodičnosti

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi). \tag{3.123}$$

Primenjujući ovaj uslov na rešenje (3.122), dobija se $\exp\left[\frac{i}{\hbar} l_z \, (\varphi + 2\pi)\right] = \exp\left[\frac{i}{\hbar} l_z \, \varphi\right]$, odnosno $\exp\left(2\pi i \, l_z/\hbar\right) = 1$. Rešenja poslednje jednačine su

$$l_z = \hbar m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{3.124}$$

i predstavljaju svojstvene vrednosti operatora $\hat{l}_z$. Vidimo da je zahvaljujući uslovu periodičnosti spektar operatora $\hat{l}_z$ diskretan, pri čemu kvantni broj m prebrojava različite svojstvene vrednosti.

Svojstvene funkcije $\Phi_m(\varphi)$ koje odgovaraju ovim svojstvenim vrednostima se mogu normirati na jedinicu, tj.

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = 1, \tag{3.125}$$

što daje $|A|^2 2\pi = 1$, odnosno $A = 1/\sqrt{2\pi}$. Prema tome, normirane svojstvene funkcije operatora $\hat{l}_z$ imaju oblik

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \, e^{im\varphi}. \tag{3.126}$$

3.4.4 Osobine svojstvenih funkcija opservabli sa diskretnim spektrom

Neka je $\hat{A}$ opservabla koja ima čisto *diskretan* spektar i neka su a_n odgovarajuće svojstvene vrednosti. Razmotrimo prvo slučaj kada je ovaj spektar *nedegenerisan*. Tada za svaku od vrednosti a_n postoji samo jedno (linearno nezavisno) rešenje ψ_n svojstvene jednačine

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n. \tag{3.127}$$

U odeljku 3.4.1 je napomenuto da se diskretan spektar javlja ukoliko svojstveni problem opservable uključuje neke granične ili periodične uslove na talasne funkcije koje su rešenja tog problema. Ovo je demonstrirano na primeru rešavanja svojstvenog problema operatora z-projekcije momenta impulsa. Drugi primer je diskretizacija vrednosti komponenti impulsa čestice koja se javlja kada se primene periodični uslovi (3.26) ili se kretanje čestice ograniči na konačnu zapreminu (v. odeljak 3.1.6). Redukujući domen talasne funkcije na konačnu oblast, ovi uslovi takođe obezbeđuju njenu kvadratnu integrabilnost. Zaključak je da svojstvene funkcije koje odgovaraju diskretnim svojstvenim vrednostima opservable imaju konačnu normu i, prema tome, opisuju prava kvantna stanja.

U odeljku 2.1.5 smo naveli da je prostor stanja kvantnog sistema neki Hilbertov prostor, čime je odezbeđeno da elementi (vektori) tog prostora imaju konačnu normu. U prilazu koji ovde koristimo reč je o funkcionalnom Hilbertovom prostoru čiji su elementi talasne funkcije. Pomenuto je, takođe, da Hilbertovi prostori uvek sadrže prebrojiv ortonormirani bazis. Konačno, u odeljku 2.2.5 je navedeno da opservable predstavljaju klasu ermitskih operatora koji imaju osobinu da svojstveni vektori (odnosno svojstvene funkcije) svakog od njih obrazuju jedan potpun ortonormirani skup, dakle svojstveni bazis, u Hilbertovom prostoru u kome deluju. U nastavku ćemo dokazati ovu osobinu tako što ćemo pokazati da svojstvene funkcije opservable koja ima diskretan nedegenerisan spektar čine ortogonalan i potpun skup funkcija u prostoru u kome ta opservabla deluje.

Kao prvo, uočimo da se svojstvene funkcije ψ_n koje su rešenja svojstvenog problema (3.127) mogu, zbog njihove konačne norme, normirati na jedinicu. U nastavku ćemo pretpostaviti da su ove funkcije već normirane. Tada možemo reći da svakoj svojstvenoj vrednosti a_n odgovara jedna svojstvena funkcija (određena do na proizvoljni fazni faktor, v. odeljke 2.2.4 i 3.1.5). Dalje, na osnovu druge od teorema izloženih u odeljku 2.2.5 sledi da su funkcije ψ_n uzajamno *ortogonalne*, tj. $(\psi_n, \psi_{n'}) = 0$ ako je $n \neq n'$. Navedene osobine se mogu zajedno izraziti u obliku uslova ortonormiranosti

$$(\psi_n, \psi_{n'}) \equiv \int \psi_n^*(\xi)\,\psi_{n'}(\xi)\,\mathrm{d}\xi = \delta_{nn'}. \tag{3.128}$$

Pokazaćemo sada da svojstvene funkcije ψ_n čine *potpun skup* u prostoru stanja, tj. da se proizvoljna talasna funkcija ψ, koja zadovoljava iste granične uslove kao i funkcije ψ_n, može napisati kao njihova linearna kombinacija

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n. \tag{3.129}$$

Za to je dovoljno pokazati da se koeficijenti u gornjem razvoju mogu odrediti za svaku funkciju ψ iz prostora stanja. Ako ovaj izraz pomnožimo skalarno sa $\psi_{n'}$ sledi $(\psi_{n'}, \psi) = \sum_n c_n (\psi_{n'}, \psi_n) = \sum_n c_n \delta_{n,n'} = c_{n'}$, tj. koeficijenti u razvoju (3.129) se računaju kao

$$c_n = (\psi_n, \psi) \equiv \int \psi_n^*(\xi)\, \psi(\xi)\, \mathrm{d}\xi. \tag{3.130}$$

Pošto je skalarni proizvod u Hilbertovom prostoru definisan između bilo koja dva elementa tog prostora, a funkcije ψ i ψ_n pripadaju prostoru stanja koji je po svojoj strukturi neki Hilbertov prostor, sledi da se koeficijenti c_n uvek mogu odrediti na ovaj način. Prema tome, skup $\{\psi_n | \forall n\}$ je potpun skup funkcija u prostoru stanja u kojem deluje opservabla $\hat{A}$, odakle uz osobinu ortonormiranosti (3.128) sledi da je taj skup svojstveni bazis ove opservable.

Koristeći razvoj (3.129) i ortonormiranost skupa funkcija ψ_n, kvadrat norme proizvoljne talasne funkcije ψ se može izraziti preko kvadrata modula koeficijenata u tom razvoju

$$\begin{aligned} \|\psi\|^2 = (\psi, \psi) &= \left(\sum_n c_n \psi_n, \sum_{n'} c_{n'} \psi_{n'} \right) = \sum_n \sum_{n'} c_n^* c_{n'} (\psi_n, \psi_{n'}) \\ &= \sum_n \sum_{n'} c_n^* c_{n'} \delta_{n,n'} = \sum_n |c_n|^2. \end{aligned} \tag{3.131}$$

U cilju određivanja verovatnoće uzimamo da je funkcija ψ normirana na jedinicu, odakle neposredno sledi

$$\sum_n |c_n|^2 = 1. \tag{3.132}$$

Ovaj izraz se naziva uslov *kompletnosti* sistema svojstvenih funkcija.

Navešćemo još da su svojstvene funkcije $\psi_n(\xi)$ opservable koja ima diskretan nedegenerisan spektar povezane relacijom *zatvorenosti*

$$\sum_n \psi_n^*(\xi')\, \psi_n(\xi) = \delta(\xi' - \xi). \tag{3.133}$$

Važenje ovog izraza se može proveriti razvijajući delta funkciju po funkcijama ψ_n, tj. polazeći od toga da se može napisati $\delta(\xi' - \xi) = \sum_n c_n(\xi')\, \psi_n(\xi)$. Da bismo odredili koeficijente $c_n(\xi')$, pomnožićemo ovaj razvoj sa $\psi_{n'}^*(\xi)$, a zatim integraliti po ξ. Dobija se $\psi_{n'}^*(\xi') = \sum_n c_n(\xi')\, \delta_{n'n} = c_{n'}(\xi')$, odnosno $c_n(\xi') = \psi_n^*(\xi')$.

Razmotrimo sada slučaj kada opservabla $\hat{A}$ ima diskretan *degenerisan* spektar. Tada za neke (ili svaku) od svojstvenih vrednosti a_n postoji više linearno nezavisnih rešenja ψ_{nk} svojstvene jednačine

$$\hat{A}\psi_{nk} = a_n\psi_{nk}. \tag{3.134}$$

Pri tome se svojstvene vrednosti a_n kojima odgovara više linearno nezavisnih svojstvenih funkcija ψ_{nk}, $k = 1, \ldots, g_n$, nazivaju degenerisane svojstvene vrednosti, a brojevi g_n predstavljaju stepen njihove degeneracije.

Napomenimo da linearno nezavisne funkcije ψ_{nl} za dato n ne moraju biti međusobno ortogonalne. Od njih se, međutim, uvek može konstruisati skup sa istim brojem *ortonormiranih* funkcija koristeći Gram-Šmitov postupak. Pretpostavljajući da su skupovi $\{\psi_{nk}|\, k = 1, \ldots, g_n\}$ za sve vrednosti kvantnog broja n ovim postupkom već ortonormirani, relacija (3.128) se uopštava na

$$(\psi_{nk}, \psi_{n'k'}) \equiv \int \psi^*_{nk}(\xi)\, \psi_{n'k'}(\xi)\, \mathrm{d}\xi = \delta_{nn'}\delta_{kk'}. \tag{3.135}$$

Ortonormirani skup svojstvenih funkcija $\{\psi_{nk}|\, k = 1, \ldots, g_n; \forall n\}$ opservable sa diskretnim degenerisanim spektrom je takođe *potpun skup* u prostoru stanja u kome ta opservabla deluje. To znači da se proizvoljna talasna funkcija ψ, koja zadovoljava iste granične uslove kao i funkcije ψ_{nk}, može napisati kao njihova linearna kombinacija

$$\psi = \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} c_{nk}\, \psi_{nk}. \tag{3.136}$$

Za to je dovoljno pokazati da se koeficijenti u gornjem razvoju mogu odrediti za svaku funkciju ψ iz prostora stanja. Ako ovaj izraz pomnožimo skalarno sa $\psi_{n'k'}$ sledi $(\psi_{n'k'}, \psi) = \sum_{nk} c_{nk}\, (\psi_{n'k'}, \psi_{nk}) = \sum_{nk} c_{nk}\, \delta_{n,n'}\delta_{k,k'} = c_{n'k'}$, tj. koeficijenti u razvoju (3.136) uvek postoje i računaju se kao

$$c_{nk} = (\psi_{nk}, \psi) \equiv \int \psi^*_{nk}(\xi)\, \psi(\xi)\, \mathrm{d}\xi. \tag{3.137}$$

Uslov *kompletnosti* (3.132) se u slučaju degenerisanog spektra uopštava na oblik

$$\sum_n \sum_{k=1}^{g_n} |c_{nk}|^2 = 1, \tag{3.138}$$

a relacija *zatvorenosti* (3.133) postaje

$$\sum_n \sum_{k=1}^{g_n} \psi^*_{nk}(\xi')\, \psi_{nk}(\xi) = \delta(\xi' - \xi). \tag{3.139}$$

Relacije se dokazuju analogno kao u slučaju nedegenerisanog spektra.

3.4.5 Verovatnoća dobijanja određene vrednosti fizičke veličine iz diskretnog spektra

Osvrnućemo se sada na zaključke iz odeljka 3.4.2 i primeniti ih na opservable sa diskretnim spektrom. Razmotrićemo prvo slučaj kada je spektar nedegenerisan.

Kao prvo, videli smo da kada se talasna funkcija ψ koja opisuje stanje kvantnog sistema poklapa sa nekom od svojstvenih funkcija ψ_n opservable $\hat{A}$, tada fizička veličina A ima određenu vrednost koja je jednaka odgovarajućoj svojstvenoj vrednosti a_n te opservable. To znači da ćemo pri ponovljenim merenjima fizičke veličine A u tom stanju (npr. pri merenju na homogenom kvantnom ansamblu u stanju ψ_n) dobijati uvek istu vrednost a_n. Drugim rečima, verovatnoća dobijanja ove vrednosti pri merenju u stanju ψ_n jednaka je jedinici.

Ukoliko se, međutim, talasna funkcija ψ ne poklapa ni sa jednom od svojstvenih funkcija ψ_n opservable $\hat{A}$, tada fizička veličina A nema određenu vrednost. U ovom slučaju, pri ponovljenim merenjima fizičke veličine A u jednom te istom stanju ψ (npr. pri merenju na homogenom kvantnom ansamblu u stanju ψ) dobijaćemo različite vrednosti a_n. Nakon velikog broja merenja dobijena srednja vrednost će biti bliska vrednosti koja sledi iz relacije (3.75).

Postavlja se, međutim, pitanje koliko iznose verovatnoće dobijanja pojedinačnih vrednosti a_n pri merenju veličine A u proizvoljnom stanju ψ. Odgovor na ovo pitanje se može dobiti analognim rezonovanjem kao u odeljku 3.1.6, gde je bilo reči o verovatnoći dobijanja određene vrednosti impulsa čestice pri njegovom merenju u proizvoljnom stanju. Ovde ćemo talasnu funkciju ψ, umesto po ravnim talasima, razviti po skupu svojstvenih funkcija ψ_n opservable $\hat{A}$ i posmatrati koeficijente c_n u tom razvoju (izraz (3.129)). Pošto svojstvene vrednosti a_n opservable $\hat{A}$ predstavljaju rezultate merenja fizičke veličine A u proizvoljnom stanju ψ, a koeficijenti c_n određuju stepen učešća odgovarajućih svojstvenih funkcija ψ_n u tom stanju, osnovana je pretpostavka da su ovi koeficijenti u relaciji sa verovatnoćama dobijanja pojedinačnih vrednosti a_n. Na tu vezu najdirektnije ukazuje uslov kompletnosti (3.132). S obzirom da su $|c_n|^2$ pozitivni realni brojevi, a njihova suma po svim mogućim vrednostima kvantnog broja n je prema tom uslovu jednaka jedinici, imajući u vidu osobine (3.38), kvadrat modula od c_n se može interpretirati kao verovatnoća da se pri merenju veličine A u stanju ψ dobije vrednost a_n, tj.

$$\mathcal{P}_n = |c_n|^2. \tag{3.140}$$

Relacija (3.140) je takođe u skladu sa formulom za srednju vrednost fizičke veličine (3.76). Koristeći razvoj (3.129) i ortonormiranost funkcija ψ_n sledi

$$\begin{aligned}\langle A\rangle = (\psi, \hat{A}\psi) &= \left(\sum_n c_n\psi_n, \hat{A}\sum_{n'} c_{n'}\psi_{n'}\right) = \left(\sum_n c_n\psi_n, \sum_{n'} c_{n'}a_{n'}\psi_{n'}\right) \\ &= \sum_n\sum_{n'} c_n^* c_{n'}a_{n'}(\psi_n, \psi_{n'}) = \sum_n\sum_{n'} c_n^* c_{n'}a_{n'}\delta_{n,n'} = \sum_n |c_n|^2 a_n.\end{aligned} \tag{3.141}$$

Poredeći poslednju sumu sa definicijom srednje vrednosti rezultata merenja (3.37) sledi da kvadrati modula koeficijenta c_n zaista predstavljaju verovatnoće dobijanja vrednosti a_n.

Analogno rezonovanje se može primeniti i na slučaj kada opservabla $\hat{A}$ ima *degenerisan* spektar. U tom slučaju prvo konstruišemo ortonormirani svojstveni bazis $\{\psi_{nk} | \, k = 1, \ldots, g_n; \forall n\}$ te opservable, a zatim talasnu funkciju ψ razvijemo po njemu (razvoj (3.136)). Uslov kompletnosti tada ima oblik (3.138) koji ukazuje da verovatnoća dobijanja vrednosti a_n pri merenju veličine A u stanju ψ iznosi

$$\mathcal{P}_n = \sum_{k=1}^{g_n} |c_{nk}|^2. \tag{3.142}$$

Poslednji izraz je takođe u skladu sa formulom za srednju vrednost (3.76). Koristeći razvoj (3.129) i ortonormiranost funkcija ψ_{nk}, analognim izvođenjem kao za nedegenerisan slučaj (3.141), dobija se da je srednja vrednost veličine A čiji operator ima diskretan degenerisan spektar

$$\langle A \rangle = \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} |c_{nk}|^2 a_n. \tag{3.143}$$

Poredeći sada ovaj izraz sa definicijom (3.37) neposredno sledi da izraz (3.142) predstavlja verovatnoću dobijanja vrednosti a_n u degenerisanom slučaju.

Na ovom mestu ćemo prodiskutovati zasnovanost formule za srednju vrednost (3.76) (ili alternativno (3.75)). Iz gornje analize proizilazi da ako pretpostavimo da ta formula važi u opštem slučaju, onda se izrazi za verovatnoću (3.140), odnosno (3.142), mogu smatrati njenim posledicama. Podsetimo se, međutim, da je formula za srednju vrednost upravo dobijena koristeći izraze za gustinu verovatnoće nalaženja čestice u nekoj tački prostora i verovatnoće dobijanja određene vrednosti impulsa čestice, i to samo za fizičke veličine koje se mogu predstaviti u obliku (3.70). Prema tome, *ako izraze za verovatnoću prihvatimo kao posledice formule za srednju vrednost, onda se formula za srednju vrednost mora tretirati kao postulat. Alternativno, može se uzeti da su izrazi za verovatnoću (3.140) i (3.142) postulati i tada se formula za srednju vrednost dobija kao njihova posledica.* (Napomenimo da su i formula za srednju vrednost i izrazi za verovatnoće potpuno u skladu sa eksperimentalnim iskustvom.) U nastavku ćemo videti da se veza između formule za srednju vrednost i izraza za verovatnoće može proširiti i na opservable sa neprekidnim spektrom.

3.4.6 Osobine svojstvenih funkcija opservabli sa neprekidnim spektrom

Analizirajući svojstvene funkcije opservabli sa diskretnim spektrom, nekoliko puta je napomenuto da se kvadratna integrabilnost tih funkcija i diskretnost spektra, objašnjavaju prisustvom graničnih ili periodičnih uslova u okviru svojstvenog problema tog operatora. Ako ovih uslova nema ili ako oni nisu dovoljno restriktivni, s jedne strane

norma svojstvenih funkcija neće biti konačna, a s druge strane neće biti redukcije skupa svojstvenih vrednosti, tj. imaćemo neprekidan spektar.

Pretpostavimo da ermitski operator $\hat{A}$ koji opisuje fizičku veličinu A ima čisto *neprekidan* spektar. Radi jednostavnosti uzećemo da je ovaj spektar *nedegenerisan*. Tada za svaku od neprebrojivo mnogo svojstvenih vrednosti a postoji jedno (linearno nezavisno) rešenje ψ_a svojstvene jednačine

$$\hat{A}\psi_a = a\psi_a. \tag{3.144}$$

Uprkos tome što svojstvene funkcije ψ_a nisu kvadratno integrabilne, one su međusobno *ortogonalne*[11] i čine *potpun* skup funkcija po kome je moguće razviti funkcije iz prostora stanja. Ovo poslednje znači da se proizvoljna talasna funkcija ψ koja zavisi od istih promenljivih kao i svojstvene funkcije ψ_a može predstaviti kao njihova superpozicija, koja zbog neprekidnosti spektra ima oblik integrala

$$\psi(\xi) = \int c(a)\,\psi_a(\xi)\,\mathrm{d}a. \tag{3.145}$$

Potreban uslov za to je egzistencija Furijeovih koeficijenata

$$c(a) = (\psi_a, \psi) \equiv \int \psi_a^*(\xi)\,\psi(\xi)\,\mathrm{d}\xi, \tag{3.146}$$

a ona je obezbeđena činjenicom da su skalarni proizvodi između funkcija ψ_a koje nemaju konačnu normu i funkcija ψ koje pripadaju Hilbertovom prostoru u praksi uvek definisani (v. odeljak 2.2.6). Pri tome, da bi se koeficijenti $c(a)$ i skalarni proizvodi (ψ_a, ψ) zaista mogli izjednačiti, neophodno je da funkcije ψ_a budu normirane na delta funkciju, tj.

$$(\psi_a, \psi_{a'}) \equiv \int \psi_a^*(\xi)\,\psi_{a'}(\xi)\,\mathrm{d}\xi = \delta(a - a'). \tag{3.147}$$

U to se možemo uveriti ako u relaciji (3.146) funkciju ψ zamenimo razvojem (3.145)

$$c(a) = (\psi_a, \psi) = \left(\psi_a, \int c(a')\,\psi_{a'}\,\mathrm{d}a'\right) = \int c(a')\,(\psi_a, \psi_{a'})\,\mathrm{d}a'. \tag{3.148}$$

Očigledno, krajnje strane ovog izraza će biti jednake jedino ako važi uslov (3.147). Na osnovu osobina ortogonalnosti i potpunosti sledi da skup svojstvenih funkcija ψ_a operatora $\hat{A}$ sa čisto neprekidnim spektrom, iako ne pripada prostoru stanja u kojem taj operator deluje (već odgovarajućem opremljenom Hilbertovom prostoru, v. odeljak 2.2.6), jeste njegov svojstveni bazis za funkcije iz prostora stanja. Prema tome, ovaj operator možemo smatrati opservablom.

Zahvaljujući uslovu (3.147), kvadrat norme talasne funkcije ψ se može izraziti kao suma kvadrata modula svih koeficijenata u razvoju (3.145), koja zbog neprekidnosti

[11] Uočimo da dokaz teoreme koja govori o ortogonalnosti svojstvenih vektora ermitskog operatora (odeljak 2.2.5) važi i u slučaju kada je spektar tog operatora neprekidan.

spektra prelazi u integral

$$\begin{aligned}\|\psi\|^2 = (\psi,\psi) &= \left(\int c(a)\,\psi_a\,\mathrm{d}a,\ \int c(a')\,\psi_{a'}\,\mathrm{d}a'\right) = \iint c(a)^*c(a')\,(\psi_a,\psi_{a'})\,\mathrm{d}a\,\mathrm{d}a' \\ &= \iint c(a)^*c(a')\,\delta(a-a')\,\mathrm{d}a\,\mathrm{d}a' = \int |c(a)|^2\,\mathrm{d}a.\end{aligned} \tag{3.149}$$

Uzimajući da je funkcija ψ normirana na jedinicu, odavde se dobija uslov *kompletnosti* skupa svojstvenih funkcija ψ_a opservable sa čisto neprekidnim spektrom

$$\int |c(a)|^2\,\mathrm{d}a = 1. \tag{3.150}$$

Ako koeficijente $c(a)$ u razvoju (3.145) zamenimo izrazom (3.146), dobija se

$$\psi(\xi) = \int c(a)\,\psi_a(\xi)\,d\xi = \int\int \psi_a^*(\xi')\,\psi(\xi')\,\psi_a(\xi)\,\mathrm{d}\xi'\,d\xi. \tag{3.151}$$

Da bi ova jednakost bila zadovoljena, očigledno mora biti

$$\int \psi_a^*(\xi')\,\psi_a(\xi)\,\mathrm{d}a = \delta(\xi'-\xi). \tag{3.152}$$

Ovaj izraz predstavlja relaciju *zatvorenosti* za skup svojstvenih funkcija neprekidnog spektra.

Ukoliko spektar opservable sadrži i *diskretne* i *neprekidne* svojstvene vrednosti, sve prethodno navedene osobine odgovarajućih svojstvenih funkcija ostaju da važe i u opštem slučaju. Npr. svojstvene funkcije su i u ovom slučaju međusobno ortogonalne, s tim da *potpun* skup funkcija sada čine funkcije iz oba dela spektra. Prema tome, razvoj proizvoljne talasne funkcije ψ po svojstvenim funkcijama opservable sa mešovitim spektrom ima oblik

$$\psi(\xi) = \sum_n c_n\psi_n(\xi) + \int c(a)\,\psi_a(\xi)\,\mathrm{d}a. \tag{3.153}$$

Uslov kompletnosti u tom slučaju glasi

$$\sum_n |c_n|^2 + \int |c(a)|^2\mathrm{d}a = 1, \tag{3.154}$$

dok relacija zatvorenosti postaje

$$\sum_n \psi_n^*(\xi')\,\psi_n(\xi) + \int \psi_a^*(\xi')\,\psi_a(\xi)\,\mathrm{d}a = \delta(\xi'-\xi). \tag{3.155}$$

3.4.7 Verovatnoća dobijanja vrednosti iz neprekidnog spektra

U slučaju neprekidnog spektra na vezu između Furijeovih koeficijenata i verovatnoće dobijanja vrednosti iz tog spektra ukazuje uslov kompletnosti (3.150). Imajući u vidu uslov (3.40), izraz $|c(a)|^2\,\mathrm{d}a$ se može interpretirati kao verovatnoća da se pri merenju veličine A u stanju ψ dobije vrednost u intervalu $a, a + \mathrm{d}a$, tj.

$$\mathrm{d}\mathcal{P} = |c(a)|^2 \mathrm{d}a. \tag{3.156}$$

Ovaj izraz je takođe u skladu sa formulom za srednju vrednost fizičke veličine. Polazeći od formule (3.76), te koristeći razvoj (3.145) i uslov (3.147), dobija se

$$\begin{aligned}
\langle A\rangle = (\psi, \hat{A}\psi) &= \left(\int c(a)\,\psi_a\,\mathrm{d}a, \hat{A}\int c(a')\,\psi_{a'}\mathrm{d}a'\right) \\
&= \iint c(a)^* c(a')\,(\psi_a, \hat{A}\psi_{a'})\,\mathrm{d}a\,\mathrm{d}a' \\
&= \iint c(a)^* c(a')\,a'(\psi_a, \psi_{a'})\,\mathrm{d}a\,\mathrm{d}a' \\
&= \iint c(a)^* c(a')\,a'\delta(a-a')\,\mathrm{d}a\,\mathrm{d}a' = \int |c(a)|^2 a\,\mathrm{d}a.
\end{aligned} \tag{3.157}$$

Poredeći poslednji izraz sa definicijom srednje vrednosti neprebrojivog skupa rezultata (3.41), sledi da kvadrat modula od $c(a)$ predstavlja gustinu verovatnoće $\rho(a)$.

Verovatnoća da se pri merenju veličine A u stanju ψ dobije vrednost iz nekog konačnog intervala (α, β) izračunava se integraljenjem izraza (3.156) po a u tim granicama

$$\mathcal{P}_{[\alpha,\beta]} = \int_\alpha^\beta |c(a)|^2 \mathrm{d}a. \tag{3.158}$$

Očigledno kada $\alpha \to \beta$ ova verovatnoća teži nuli. Prema tome, *verovatnoća dobijanja određene vrednosti a koja pripada neprekidnom spektru opservable $\hat{A}$ jednaka je nuli*

$$\mathcal{P}_{\{a\}} = 0. \tag{3.159}$$

S obzirom da je za dobijanje određene vrednosti a potrebno i dovoljno da se sistem nalazi u stanju opisanom svojstvenom funkcijom ψ_a, rezultat (3.159) ukazuje da se kvantni sistem nikada ne može naći u stanju opisanom svojstvenom funkcijom koja odgovara nekoj neprekidnoj svojstvenoj vrednosti. Ovaj zaključak je u skladu sa ranije utvrđenom činjenicom da ove funkcije ne mogu opisivati prava kvantna stanja jer nisu kvadratno integrabilne funkcije.

S druge strane, superpozicija funkcija ψ_a oblika (3.145) može da bude kvadratno integrabilna funkcija ψ (uz uslov kompletnosti (3.150)), tj. da predstavlja kvantno stanje, ali tada fizička veličina A nema određenu vrednost. U tom kontekstu treba shvatiti i činjenicu da se verovatnoća dobijanja vrednosti fizičke veličine koje pripadaju neprekidnom spektru, za razliku od vrednosti diskretnog spektra, uvek određuje na nekom intervalu.

3.4.8 Primeri normiranja svojstvenih funkcija opservabli sa neprekidnim spektrom

Svojstvene funkcije impulsa (ravni talasi). Rešavanje svojstvenog problema komponente impulsa je predstavljeno kao prvi primer u odeljku 3.4.3. Svojstvene funkcije opservable $\hat{p}_x$ su ravni talasi (3.116) sa talasnim vektorom usmerenim u pravcu x-ose. Odgovarajuće rešenje za česticu u trodimenzionom prostoru je ravni talas $\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = Ae^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}$ čiji je talasni vektor usmeren u pravcu impulsa čestice $\mathbf{p}$. Skalarni proizvod dva proizvoljna ravna talasa je

$$\int \phi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\,\phi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V = |A|^2 \int e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{r}}\mathrm{d}V = |A|^2(2\pi\hbar)^3\delta(\mathbf{p}'-\mathbf{p}), \tag{3.160}$$

pri čemu je primenjena definicija delta funkcije u obliku (2.100). Uslov normiranja (3.147) tada daje $|A|^2(2\pi\hbar)^3 = 1$, tj.

$$\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}. \tag{3.161}$$

Skup ovih funkcija je potpun jer je po tom skupu moguće razviti proizvoljnu funkciju $\psi(\mathbf{r})$ konačne norme zahvaljujući egzistenciji Furijeovih koeficijenata

$$c(\mathbf{p}) = (\phi_{\mathbf{p}}, \psi) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V. \tag{3.162}$$

Svojstvene funkcije koordinate. Neka su funkcije $\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r})$ rešenja svojstvenog problema operatora koordinate koja odgovaraju svojstvenim vrednostima $\mathbf{r}'$, tj.

$$\hat{\mathbf{r}}\,\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}'\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}). \tag{3.163}$$

Pošto je $\hat{\mathbf{r}}$ multiplikativni operator, tj. $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$, jednačina se svodi na $(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = 0$, odakle proizilazi da je $\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = 0$ za $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$ i $\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) \neq 0$ za $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. (Trivijalno rešenje $\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = 0$, $\forall\mathbf{r}$ zbog nulte norme ne razmatramo.) Prema tome, možemo očekivati da je $\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) \sim \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Uslov normiranja (3.147) ovde daje

$$\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{3.164}$$

Uočimo da se Furijeovi koeficijenti u razvoju proizvoljne talasne funkcije $\psi(\mathbf{r})$ po svojstvenim funkcijama $\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r})$ svode na vrednosti same funkcije ψ

$$c(\mathbf{r}') = \int \psi^*_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V = \int \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V = \psi(\mathbf{r}'). \tag{3.165}$$

Zahvaljujući egzistenciji Furijeovih koeficijenata, skup svojstvenih funkcija koordinate je takođe potpun, tj. predstavlja bazis za funkcije iz prostora stanja čestice. Zamenjujući rezultat (3.165) u izraz za verovatnoću (3.156), dobijamo izraz za verovatnoću nalaženja čestice u zapremini $\mathrm{d}V$ oko tačke $\mathbf{r}$

$$\mathrm{d}\mathcal{P} = |\psi(\mathbf{r})|^2\mathrm{d}V, \tag{3.166}$$

što nije ništa drugo nego izraz (3.22) za slučaj jedne čestice.

3.4.9 Istovremeno merenje više fizičkih veličina. Kompatibilne opservable

Princip neodređenosti, o kome je bilo reči u uvodnoj glavi, tvrdi da među fizičkim veličinama koje odgovaraju istom sistemu, neke nije moguće precizno odrediti istovremeno sa drugim. Ovde ćemo ispitati pod kojim uslovima dve ili više fizičkih veličina mogu da imaju istovremeno (tj. u istom stanju) određene vrednosti. S obzirom da fizička veličina ima određenu vrednost isključivo ako se sistem nalazi u stanju opisanom talasnom funkcijom koja se poklapa sa nekom svojstvenom funkcijom odgovarajuće opservable (v. odeljak 3.4.1), jasno je da je istovremeno i precizno merenje dve ili više fizičkih veličina moguće samo ako odgovarajuće opservable imaju *zajednički skup svojstvenih funkcija*.

Dokazaćemo sledeću teoremu: *Dve fizičke veličine mogu istovremeno imati određene vrednosti ako i samo ako njihovi operatori komutiraju*.

Pretpostavimo prvo da fizičke veličine A i B imaju određene vrednosti a_n i b_n istovremeno, tj. u istom stanju sistema. Radi jednostavnosti uzećemo da su ove svojstvene vrednosti nedegenerisane. Tada je stanje sistema opisano funkcijom ψ_n koja je zajednička svojstvena funkcija operatora $\hat{A}$ i $\hat{B}$, tj.

$$\begin{aligned} \hat{A}\psi_n &= a_n\psi_n, \\ \hat{B}\psi_n &= b_n\psi_n. \end{aligned} \tag{3.167}$$

Množeći ove relacije sa leve strane operatorom $\hat{B}$ odnosno $\hat{A}$, dobijamo

$$\begin{aligned} \hat{B}\hat{A}\psi_n &= \hat{B}a_n\psi_n = a_n\hat{B}\psi_n = a_nb_n\psi_n, \\ \hat{A}\hat{B}\psi_n &= \hat{A}b_n\psi_n = b_n\hat{A}\psi_n = b_na_n\psi_n, \end{aligned} \tag{3.168}$$

a njihovim oduzimanjem sledi

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi_n = (b_na_n - a_nb_n)\psi_n = 0. \tag{3.169}$$

Pošto se proizvoljna talasna funkcija može predstaviti kao linearna kombinacija svojstvenih funkcija ψ_n, tj. $\psi = \sum_n c_n\psi_n$, dobija se

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi = \sum_n c_n(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi_n = 0. \tag{3.170}$$

Prema tome, zbog proizvoljnosti ψ, imamo $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$, tj.

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0. \tag{3.171}$$

Pretpostavimo sada da operatori $\hat{A}$ i $\hat{B}$ komutiraju, tj. da je $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Uzećemo opet da su spektri operatora $\hat{A}$ i $\hat{B}$ nedegenerisani. Ako su ψ_n svojstvene funkcije operatora $\hat{B}$, onda je $\hat{B}\psi_n = b_n\psi_n$, a množenjem ovog izraza sa leve strane operatorom $\hat{A}$ sledi $\hat{A}\hat{B}\psi_n = \hat{A}b_n\psi_n$. Zahvaljujući komutiranju ovih operatora možemo pisati

$$\hat{B}(\hat{A}\psi_n) = b_n(\hat{A}\psi_n). \tag{3.172}$$

Ova jednačina ima oblik svojstvenog problema operatora $\hat{B}$, odakle sledi da su $\hat{A}\psi_n$ svojstvene funkcije tog operatora koje odgovaraju svojstvenim vrednostima b_n. Pošto su svojstvene vrednosti nedegenerisane, funkcije ψ_n i $\hat{A}\psi_n$ se mogu razlikovati samo do na proizvoljni faktor, tj. $\hat{A}\psi_n = c\psi_n$. Očigledno, faktor c je svojstvena vrednost od $\hat{A}$ koja odgovara svojstvenoj funkciji ψ_n, tj. $c = a_n$. Dakle

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n. \tag{3.173}$$

Napomenimo da, ukoliko komutirajući operatori $\hat{A}$ i $\hat{B}$ imaju degenerisane svojstvene vrednosti, tada svojstvene funkcije ψ_{nk} operatora $\hat{B}$ u opštem slučaju neće biti svojstvene funkcije operatora $\hat{A}$. Međutim, može se pokazati da je u tom slučaju uvek moguće konstruisati linearne kombinacije funkcija ψ_{nk} koje će biti svojstvene funkcije operatora $\hat{A}$.

Fizičke veličine čiji operatori (opservable) međusobno komutiraju obično se nazivaju *kompatibilnim* veličinama, što ukazuje na mogućnost njihovog istovremenog i tačnog određivanja.

3.4.10 Relacije neodređenosti

Prema teoremi iz prethodnog odeljka, dve fizičke veličine ne mogu istovremeno imati određene vrednosti ni u jednom kvantnom stanju ukoliko njihovi operatori ne komutiraju. Sada ćemo pokazati da ako poznajemo njihove komutacione relacije, možemo odrediti nejednakosti kojima su povezana srednja kvadratna odstupanja tih veličina od njihovih srednjh vrednosti, tj. relacije neodređenosti.

Neka su fizičkim veličinama A i B pridruženi ermitski operatori $\hat{A}$ i $\hat{B}$. U odeljku 3.3.4 smo pokazali da je tada operator $\hat{C}$, koji je definisan izrazom $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, takođe ermitski operator. Radi konciznijeg pisanja uvešćemo operatore odstupanja od srednjih vrednosti

$$\delta\hat{A} = \hat{A} - \langle A\rangle, \quad \delta\hat{B} = \hat{B} - \langle B\rangle. \tag{3.174}$$

Tada je

$$\begin{aligned}
[\delta\hat{A}, \delta\hat{B}] &= [\hat{A} - \langle A\rangle, \hat{B} - \langle B\rangle] \\
&= (\hat{A} - \langle A\rangle)(\hat{B} - \langle B\rangle) - (\hat{B} - \langle B\rangle)(\hat{A} - \langle A\rangle) \\
&= \hat{A}\hat{B} - \langle A\rangle\hat{B} - \langle B\rangle\hat{A} + \langle A\rangle\langle B\rangle \\
&\quad -\hat{B}\hat{A} + \langle A\rangle\hat{B} + \langle B\rangle\hat{A} - \langle A\rangle\langle B\rangle \\
&= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}.
\end{aligned} \tag{3.175}$$

Da bismo došli do relacije koja povezuje srednja kvadratna odstupanja veličina A i B pri njihovom merenju u proizvoljnom stanju ψ, posmatrajmo kvadrat norme izraza $(\lambda\delta\hat{A} - i\delta\hat{B})\psi$ koji zavisi od nekog parametra λ

$$I(\lambda) = \|(\lambda\delta\hat{A} - i\delta\hat{B})\psi\|^2 \tag{3.176}$$

i koji je po definiciji realan nenegativan broj. Ovaj izraz se dalje transformiše na

sledeći način

$$\begin{aligned} I(\lambda) &= ((\lambda\delta\hat{A} - i\delta\hat{B})\psi, (\lambda\delta\hat{A} - i\delta\hat{B})\psi) \\ &= (\psi, (\lambda\delta\hat{A} - i\delta\hat{B})^{+}(\lambda\delta\hat{A} - i\delta\hat{B})\psi) \\ &= (\psi, (\lambda\delta\hat{A} + i\delta\hat{B})(\lambda\delta\hat{A} - i\delta\hat{B})\psi) \\ &= (\psi, (\lambda^2\delta\hat{A}^2 + i\lambda\delta\hat{B}\delta\hat{A} - i\lambda\delta\hat{A}\delta\hat{B} + \delta\hat{B}^2)\psi) \\ &= \lambda^2(\psi, \delta\hat{A}^2\psi) - i\lambda(\psi, [\delta\hat{A}, \delta\hat{B}]\psi) + (\psi, \delta\hat{B}^2\psi) \\ &= \lambda^2(\psi, \delta\hat{A}^2\psi) + \lambda(\psi, \hat{C}\psi) + (\psi, \delta\hat{B}^2\psi) \\ &= \lambda^2(\Delta A)^2 + \lambda\langle C\rangle + (\Delta B)^2. \end{aligned} \tag{3.177}$$

Prema tome, $I(\lambda)$ je kvadratna forma po parametru λ. Da bi bio zadovoljen uslov $I(\lambda) \geq 0$, tj. da funkcija $I(\lambda)$ nema realnih nula ili ima samo jednu, diskriminanta ove kvadratne forme mora biti manja ili jednaka nuli

$$D = \langle C\rangle^2 - 4(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \leq 0, \tag{3.178}$$

što daje uslov $(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4}\langle\hat{C}\rangle^2$ ili

$$\Delta A\,\Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle\hat{C}\rangle|, \tag{3.179}$$

Ovo su *relacije neodređenosti* u opštem slučaju.

Ako izaberemo za veličine A i B međusobno konjugovane komponente koordinate i impulsa, na osnovu njihovih komutacionih relacija (3.99) sledi da je tada $\hat{C} = \hbar$, pa odgovarajuće relacije neodređenosti glase

$$\Delta x\,\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta y\,\Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta z\,\Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{3.180}$$

Posebnu ulogu u kvantnoj mehanici imaju stanja sa minimalnom neodređenošću, tj. kada je $\Delta A\,\Delta B = \frac{1}{2}|\langle\hat{C}\rangle|$. Tada su $I(\lambda) = 0$ i $D = 0$, odakle je

$$\lambda = -\frac{|\langle C\rangle|}{2(\Delta A)^2}. \tag{3.181}$$

Stanja sa minimalnom neodređenošću koordinate i impulsa se zovu *koherentna stanja*.

3.4.11 Određivanje stanja kvantnih sistema. Kompletan skup kompatibilnih opservabli

Na osnovu postulata o stanjima, talasna funkcija koja opisuje stanje kvantnog sistema potpuno određuje sve njegove osobine u tom stanju. S druge strane, talasna funkcija nije merljiva veličina, odakle proizilazi da se stanje sistema ne može odrediti neposrednim merenjem veličine kojom je ono opisano. Umesto toga vrši se merenje

drugih (merljivih) fizičkih veličina, a onda se stanje određuje na osnovu dobijenih vrednosti za te veličine.

U tom smislu postupak određivanja stanja u kvantoj mehanici ima sličnosti sa onim u klasičnoj mehanici gde je stanje zadato vrednostima nezavisnih dinamičkih promenljivih kojih, ako je broj stepeni slobode sistema N, ima ukupno $2N$. To mogu biti npr. sve nezavisne komponente koordinate i impulsa. Za jednu česticu je $N = 3$, a njeno stanje je u datom trenutku određeno tačkom u šestodimenzionom faznom prostoru.

U kvantnoj mehanici se, međutim, ne mogu istovremeno precizno odrediti fizičke veličine koje međusobno ne komutiraju. Npr. ako odredimo vrednosti svih komponenti koordinata, komponente impulsa ostaće neodređene. Slično se pokazuje i za neki drugi izbor dinamičkih promenljivih. Prema tome, stanje kvantnog sistema će biti okarakterisano vrednostima nezavisnih fizičkih veličina koje mogu istovremeno imati određene vrednosti, tj. čiji operatori uzajamno komutiraju (kompatibilne veličine). Postavlja se, međutim, pitanje koliki broj kompatibilnih veličina je potrebno poznavati da bi stanje bilo potpuno određeno.

Da bismo odgovorili na poslednje pitanje pretpostavićemo da opservabla $\hat{A}$, koja odgovara veličini A koju merimo u cilju određivanja stanja, ima *nedegenerisan* spektar. Pošto je korespodencija između nedegenerisanih svojstvenih vrednosti i svojstevnih stanja jednoznačna, u ovom slučaju znamo da ako veličina A ima određenu vrednost a, stanje u kome se sistem nalazi je opisano svojstvenom funkcijom ψ_a koja odgovara toj vrednosti. Prema tome, u ovom slučaju za određivanje stanja dovoljna je samo opservabla $\hat{A}$, tj. dovoljno je poznavati vrednost samo veličine A. Iz tog razloga se opservabla čiji je spektar nedegenerisan naziva *kompletna opservabla*.

Naravno, može se desiti da veličina A, iako je odgovarajuća opservabla kompletna, nema određenu vrednost u stanju u kome se sistem nalazi jer ono pre merenja ne mora da se poklapa ni sa jednim od svojstvenih stanja ove veličine. Međutim, nakon merenja i dobijanja neke od svojstvenih vrednosti a opservable $\hat{A}$, sistem će biti preveden u svojstveno stanje ψ_a koje je tim merenjem potpuno određeno. Napomenimo da ovim merenjem nije moguće pouzdano utvrditi u kom stanju se sistem prethodno nalazio, čak i ako se ono izvrši veliki broj puta na homogenom kvantnom ansamblu.[12] Izuzetak je slučaj kada je početno stanje neko od svojstvenih stanja.

Ako je spektar opservable *degenerisan*, njene svojstvene vrednosti ne određuju potpuno stanje sistema i, prema tome, ona *nije* kompletna opservabla. Opservable koje nisu kompletne mogu se dopuniti do *kompletnog skupa* opservabli, pri čemu te opservable moraju biti *kompatibilne* (komutirajuće). Broj opservabli koje čine kompletan skup predstavlja broj stepeni slobode N kvantnog sistema. U većini slučajeva on se poklapa sa brojem stepeni slobode tog sistema u klasičnom opisu.

[12] Ako se merenje veličine A ponovi veliki broj puta u istom početnom stanju (npr. ako se vrši na homogenom kvantnom ansamblu), na osnovu relativnih frekvenci dobijenih rezultata moguće je proceniti verovatnoće njihovog dobijanja. S druge strane, da bismo odredili talasnu funkciju početnog stanja ψ koja se može napisati u obliku razvoja po svojstvenim funkcijama ψ_a, neophodno je poznavati koeficijente $c_n = (\psi_n, \psi)$. Verovatoće nam, međutim, daju samo kvadrate modula ovih koeficijenta dok njihove faze ostaju nepoznate.

Neka je $\hat{A}_1, \ldots, \hat{A}_N$ neki kompletan skup kompatibilnih opservabli. U tom slučaju svakoj kombinaciji svojstvenih vrednosti ovih opservabli $a_1, \ldots, a_N$ jednoznačno je pridružena *zajednička* svojstvena funkcija $\psi_{a_1,\ldots,a_N}$, tj.

$$\begin{aligned} \hat{A}_1 \psi_{a_1,\ldots,a_N} &= a_1 \psi_{a_1,\ldots,a_N}, \\ \vdots \qquad\qquad & \qquad \vdots \\ \hat{A}_N \psi_{a_1,\ldots,a_N} &= a_N \psi_{a_1,\ldots,a_N}, \end{aligned} \tag{3.182}$$

čime je stanje sistema jednoznačno određeno. Drugim rečima, ako su poznate vrednosti svih nezavisnih fizičkih veličina koje imaju određene vrednosti u datom stanju, tada talasna funkcija takvog stanja mora biti svojstvena funkcija svih operatora koji odgovaraju ovim fizičkim veličinama.

Potsetimo se ovde da vrednosti neke veličine koje pripadaju neprekidnom spektru odgovarajuće opservable ustvari ne mogu biti tačno određene. Iz tog razloga ni odgovarajuća svojstvena stanja *ne mogu* biti tačno određena. Njihova neostvarljivost je u vezi sa nenormiranošću svojstvenih funkcija ψ_a, a stanja koja se mogu ostvariti će imati oblik superpozicije svojstvenih funkcija koje odgovaraju vrednostima veličine A iz nekog intervala oko svojstvene vrednosti a (talasni paket). Ovo treba imati u vidu ako kompletan skup kompatibilnih opservabli sadrži opservable sa neprekidnim spektrom.

Uzmimo opet kao primer kretanje slobodne čestice duž x-ose (jednodimenzioni problem). U tom slučaju je komponenta impulsa $\hat{p}_x$ kompletna opservabla (svojstvene vrenosti p_x su nedegenerisane). Međutim, ova opservabla ima čisto neprekidan spektar i njene svojstvene funkcije (ravni talasi) ne predstavljaju kvantna stanja. Njihove linearne kombinacije (talasni paketi) oblika (3.9), međutim, predstavljaju kvantna stanja, ali vrednosti p_x tada nisu precizno određene već leže u nekom intervalu.

4 Promena stanja kvantnog sistema sa vremenom i stacionarna stanja

4.1 Šredingerova jednačina

4.1.1 Opšti uslovi koje treba da ispunjava jednačina evolucije kvantnog stanja

Razvijajući de Broljevu ideju o talasnim svojstvima materije, Šredinger je 1926. godine postavio svoju čuvenu jednačinu koja određuje promenu stanja (evoluciju) kvantnog sistema sa vremenom. Prema tome, uloga koju Šredingerova jednačina ima u kvantnoj mehanici analogna je ulozi koju imaju jednačine kretanja u klasičnoj mehanici. Njen oblik je

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \tag{4.1}$$

gde je $\hat{H}$ Hamiltonov operator (hamiltonijan), koji se dobija kvantizacijom (v. odeljak 3.3.4) Hamiltonove funkcije odgovarajućeg klasičnog sistema. Ukoliko su sile koje deluju na sistem potencijalne, hamiltonijan se poklapa sa operatorom energije i može se napisati (u nerelativističkom prilazu) kao suma operatora kinetičke i potencijalne energije. Rešenja jednačine (4.1) su talasne funkcije $\psi(\xi, t)$, koje pored prostornih koordinata ξ zavise i od vremena t, i na taj način opisuju evoluciju kvantnog sistema. Pokazaćemo da je oblik kakav ima Šredingerova jednačina potreban da bi talasne funkcije, kao njena rešenja, zadovoljavale određene fizičke zahteve.

Kao prvo, Šredingerova jednačina je diferencijalna jednačina *prvog* reda po vremenu i ovaj uslov je neophodan radi *principa kauzalnosti*. Naime, rešenja jednačine oblika (4.1) jednoznačno određuju talasnu funkciju $\psi(\xi, t)$ u svakom trenutku vremena ukoliko je ona zadata u nekom početnom trenutku. Ovo je u skladu sa stavom da je stanje fizičkog sistema potpuno određeno kada je talasna funkcija jednom data.[1] Pri tome, da bi rešenja Šredingerove jednačine mogla da budu periodične funkcije po vremenu, u jednačini je neophodno da uz izvod $\partial\psi/\partial t$ stoji imaginarna jedinica. Drugi važan uslov je *linearnost* Šredingerove jednačine koji je nophodan da bi važio *princip superpozicije*. Ovaj uslov je obezbeđen linearnošću operatora $i\hbar\partial/\partial t$ i $\hat{H}$. Konačno,

[1] Ovde postoji bitna razlika u odnosu na druge oblasti fizike gde su talasne jednačine obično diferencijalne jednačne drugog reda po vremenu (npr. jednačine za mehaničke talase ili elektromagnetne talase). U tom slučaju, da bi rešenje jednačine opisivalo neki određeni talas, pored vrednosti u početnom trenutku, neophodno je poznavati i vrednost prvog izvoda rešenja po vremenu u tom trenutku.

Šredingerova jednačina ima oblik koji je analogan obliku nekih jednačina klasične mehanike, što je u skladu sa *principom korespondencije*.

Sam Šredinger je pri traženju jednačine pošao od pretpostavke da ona mora davati rešenja kao što predviđa de Broljeva teorija, a da u graničnom slučaju malih talasnih dužina rešenja treba da budu u skladu sa onim što daje klasična mehanika. Poslednji zahtev je analogan aproksimaciji geometrijske optike kod elektromagnetnih talasa, gde su putanje svetlosnih zraka određene u skladu sa Fermaovim (Pierre de Fermat) principom koji u optici predstavlja pandan principu najmanjeg dejstva iz mehanike.

4.1.2 Šredingerova jednačina za česticu u datom potencijalu

Predstavićemo rezonovanje koje u osnovi sledi Šredingerovu ideju i ukazuje na oblik jednačine za talasnu funkciju čestice u datom potencijalu. Razmotrićemo prvo kretanje slobodne čestice. Kao što smo videli u prethodnoj glavi (odeljak 3.1.4), talasna funkcija slobodne čestice se u opštem slučaju može napisati u obliku talasnog paketa

$$\psi(\mathbf{r},t) = \int A(\mathbf{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)}\,\mathrm{d}\mathbf{p}, \tag{4.2}$$

koji predstavlja superpoziciju monohromatskih ravnih talasa (3.2) čija je frekvencija $E/\hbar$ povezana sa talasnim vektorom $\mathbf{p}/\hbar$ relacijom koja povezuje impuls i energiju čestice mase m

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \tag{4.3}$$

Diferenciranjem obe strane izraza (4.2) parcijalno po vremenu i po koordinatama, dobija se

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = \int E\,A(\mathbf{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)}\,\mathrm{d}\mathbf{p}, \tag{4.4}$$

$$-i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r},t) = \int \mathbf{p}\,A(\mathbf{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)}\,\mathrm{d}\mathbf{p}, \tag{4.5}$$

$$-\hbar^2\Delta\psi(\mathbf{r},t) = \int \mathbf{p}^2 A(\mathbf{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)}\,\mathrm{d}\mathbf{p}. \tag{4.6}$$

Uzimajući u obzir relaciju (4.3), jasno je da su desne strane izraza (4.4) i izraza (4.6) podeljenog sa $2m$ jednake. Prema tome, mora da važi

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\psi(\mathbf{r},t). \tag{4.7}$$

Ovo je Šredingerova jednačina za slobodnu česticu i njena rešenja su ravni talasi (3.2), odnosno njihova superpozicija (4.2).

Uzmimo sada da se čestica kreće u potencijalu $V(\mathbf{r})$ i razmotrimo njen talasni aspekt pod pretpostavkom da važe analogni uslovi kao u aproksimaciji geometrijske optike. Pretpostavljajući da je stanje čestice i u ovom slučaju opisano nekim talasnim

paketom $\psi(\mathbf{r}, t)$, te polazeći od principa korespondencije, osnovano možemo smatrati da se u graničnom slučaju malih talasnih dužina centar paketa kreće približno kao klasična čestica mase m čiji su položaj $\mathbf{r}_{\mathrm{kl}}$, impuls $\mathbf{p}_{\mathrm{kl}}$ i energija E_{kl} povezani relacijom

$$E_{\mathrm{kl}} = H(\mathbf{p}_{\mathrm{kl}}, \mathbf{r}_{\mathrm{kl}}) \equiv \frac{\mathbf{p}_{\mathrm{kl}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}_{\mathrm{kl}}), \tag{4.8}$$

gde je $H(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ Hamiltonova funkcija koja opisuje klasično kretanje te čestice u potencijalu $V(\mathbf{r})$. Ovde ćemo pretpostaviti da $V(\mathbf{r})$ ne zavisi eksplicitno od vremena (tj. da je sistem konzervativan), mada ovaj uslov nije neophodan za krajnji zaključak. Dinamičke promenjive $\mathbf{r}_{\mathrm{kl}}$ i $\mathbf{p}_{\mathrm{kl}}$ su pri tome funkcije vremena koje se mogu odrediti npr. rešavanjem odgovarajućih Hamiltonovih jednačina. U okviru aproksimacije koju razmatramo možemo uzeti da je čestica dobro lokalizovana u prostoru (male talasne dužine impliciraju velike vrednosti talasnih brojeva i malu neodređenost položaja), te da se potencijal $V(\mathbf{r})$ može smatrati približno konstantnim u oblasti prostora reda veličine talasnog paketa, dakle

$$V(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r}, t) \approx V(\mathbf{r}_{\mathrm{kl}})\,\psi(\mathbf{r}, t). \tag{4.9}$$

Ako se, sa druge strane, ograničimo na dovoljno mali vremenski interval da se promena impulsa $\mathbf{p}_{\mathrm{kl}}$ može smatrati zanemarljivom, tada se talasna funkcija ψ može aproksimirati talasnim paketom tipa (4.2) čije su frekvencije u okolini $E_{\mathrm{kl}}/\hbar$, a talasni vektori u okolini $\mathbf{p}_{\mathrm{kl}}/\hbar$. Pod tom pretpostavkom imamo

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(\mathbf{r}, t) \approx E_{\mathrm{kl}}\,\psi(\mathbf{r}, t), \tag{4.10}$$

$$-i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}, t) \approx \mathbf{p}_{\mathrm{kl}}\,\psi(\mathbf{r}, t), \tag{4.11}$$

$$-\hbar^2\Delta\psi(\mathbf{r}, t) \approx \mathbf{p}_{\mathrm{kl}}^2\,\psi(\mathbf{r}, t). \tag{4.12}$$

Kombinujući relacije (4.8)-(4.12), dobijamo

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(\mathbf{r}, t) + \frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\psi(\mathbf{r}, t) - V(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r}, t) \approx \left(E_{\mathrm{kl}} - \frac{\mathbf{p}_{\mathrm{kl}}^2}{2m} - V(\mathbf{r}_{\mathrm{kl}})\right)\psi(\mathbf{r}, t) \approx 0. \tag{4.13}$$

Prema tome, u okviru razmatrane aproksimacije, talasni paket $\psi(\mathbf{r}, t)$ zadovoljava jednačinu oblika

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r}, t). \tag{4.14}$$

Pokazalo se da ova jednačina važi u opštem slučaju, tj. čak i kada uslov malih talasnih dužina nije ispunjen. To je Šredingerova jednačina za česticu u potencijalu $V(\mathbf{r})$. S obzirom da je hamiltonijan ovog sistema oblika (3.108), vidimo da je ona u skladu sa opštim izrazom (4.1).

Na kraju ove analize možemo zaključiti da se Šredingerova jednačina u opštem slučaju, kao i ostali opšti principi u fizici, ne može eksplicitno izvesti iz drugih principa već se verifikacija dobija iz eksperimenata, tj. smatramo je *postulatom*.

4.1.3 Veza sa klasičnom mehanikom

Do Šredingerove jednačine se može doći polazeći od odgovarajućih klasičnih jednačina kretanja formalnim prelazom sa klasičnih veličina na operatore. Pokazuje se da se taj prelaz najdirektnije ostvaruje polazeći od Hamilton-Jakobijeve jednačine

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = H\left(\frac{\partial S}{\partial \xi_1}, \frac{\partial S}{\partial \xi_2}, \ldots; \xi_1, \xi_2, \ldots; t\right) \tag{4.15}$$

u kojoj $H(p_1, p_2, \ldots; \xi_1, \xi_2, \ldots; t)$ predstavlja Hamiltonovu funkciju posmatranog sistema koja zavisi od svih njegovih nezavisnih koordinata $\xi_1, \xi_2, \ldots$, konjugovanih impulsa $p_1, p_2, \ldots$ i vremena t, a S je funkcija dejstva koja predstavlja rešenje jednačine. Konjugovani impulsi su pri tome određeni relacijama $p_i = \partial S / \partial \xi_i$. Ukoliko je sistem *konzervativan*, Hamiltonova funkcija ne zavisi od vremena, tj. predstavlja integral kretanja, i obično se poklapa sa ukupnom energijom sistema, tj.

$$E = H(p_1, p_2, \ldots; \xi_1, \xi_2, \ldots). \tag{4.16}$$

Pošto relacije između impulsa i dejstva važe u opštem slučaju, iz jednakosti (4.16) i (4.15) sledi da za konzervativne sisteme važi

$$E = -\frac{\partial S}{\partial t}, \quad p_i = \frac{\partial S}{\partial \xi_i}. \tag{4.17}$$

Da bismo izvršili prelaz sa klasične na kvantnu jednačinu kretanja, pođimo od toga da Hamilton-Jakobijeva jednačina u slučaju konzervativnih sistema formalno sledi iz zakona održanja energije (4.16) primenjujući relacije (4.17). Ove relacije, s druge strane, ukazuju na formalnu vezu između klasičnih veličina E i p_i i odgovarajućih diferencijalnih operatora

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad p_i \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial \xi_i} \equiv \hat{p}_i, \tag{4.18}$$

koju smo već videli u relacijama (4.10) i (4.11). Ovi operatori delovanjem na talasnu funkciju, koja je rešenje tražene kvantne jednačine, daju vrednosti odgovarajućih fizičkih veličina pomnožene tom funkcijom. Sprovodeći prelaze (4.18) sa klasičnih veličina na operatore u jednačini (4.16), što na desnoj strani daje hamiltonijan $\hat{H} = H(\hat{p}_1, \hat{p}_2, \ldots; \xi_1, \xi_2, \ldots)$, a zatim delujući obema stranama na talasnu funkciju, neposredno se dobija Šredingerova jednačina u obliku (4.1).

4.1.4 Održanje norme talasne funkcije, gustina struje verovatnoće i jednačina kontinuiteta

Iz zakona evolucije stanja kvantnog sistema predstavljenog Šredingerovom jednačinom sledi da se norma talasne funkcije održava u toku vremena. Ova osobina je od suštinskog značaja za računanje verovatnoće, jer se time omogućava da totalna

verovatnoća u svakom trenutku bude normirana na jedinicu. Da bismo pokazali navedenu osobinu, odredimo prvo parcijalni izvod kvadrata modula talasne funkcije po vremenu, zamenjujući pri tome izvode $\partial\psi/\partial t$ izrazom $(i\hbar)^{-1}\hat{H}\psi$ koji sledi iz Šredingerove jednačine

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\psi)^*\psi + \frac{1}{i\hbar}\psi^*(\hat{H}\psi). \tag{4.19}$$

Izvod kvadrata norme talasne funkcije po vremenu tada možemo napisati u obliku

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\psi\|^2 &\equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int|\psi(\xi,t)|^2\,\mathrm{d}\xi = \int\frac{\partial}{\partial t}|\psi(\xi,t)|^2\,\mathrm{d}\xi \\ &= -\frac{1}{i\hbar}\int[\hat{H}\psi(\xi,t)]^*\psi(\xi,t)\,\mathrm{d}\xi + \frac{1}{i\hbar}\int\psi^*(\xi,t)\hat{H}\psi(\xi,t)\,\mathrm{d}\xi.\end{aligned} \tag{4.20}$$

Predstavljajući skalarne proizvode, koji su ovde izraženi preko integrala, u simboličkom obliku i uzimajući u obzir da je hamiltonijan ermitski operator, sledi

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\psi\|^2 = -\frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\psi,\psi) + \frac{1}{i\hbar}(\psi,\hat{H}\psi) = -\frac{1}{i\hbar}(\psi,\hat{H}\psi) + \frac{1}{i\hbar}(\psi,\hat{H}\psi) = 0. \tag{4.21}$$

Prema tome, norma talasne funkcije $\|\psi\|$ se ne menja u toku vremena. Uočimo da ovo važi bez obzira da li hamiltonijan zavisi od vremena ili ne.

Posmatrajmo sada parcijalni izvod po vremenu od gustine verovatnoće nalaženja čestice $\rho(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^2$ kada se ta čestica kreće u polju potencijalnih sila. U tom slučaju hamiltonijan ima oblik (3.108) na osnovu čega jednakost (4.19) postaje

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) &= -\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* + V\psi^*\right)\psi + \frac{1}{i\hbar}\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi\right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi}(\psi\Delta\psi^* - \psi^*\Delta\psi).\end{aligned} \tag{4.22}$$

Krajnji izraz je posledica jednakosti $V\psi^*\psi = \psi^*V\psi$ koja važi zbog multiplikativnog karaktera operatora potencijalne energije $V(\mathbf{r})$.

Rezultat (4.22) dobija jasno fizičko značenje ako uvedemo *gustinu struje verovatnoće*

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*). \tag{4.23}$$

Uočimo da je divergencija ovog vektora jednaka krajnjem izrazu u transformacijama (4.22) sa promenjenim znakom

$$\begin{aligned}\mathrm{div}\mathbf{j} = \nabla\cdot\mathbf{j} &= \frac{\hbar}{2mi}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \\ &= \frac{\hbar}{2mi}(\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi + \psi^*\nabla^2\psi - \nabla\psi\cdot\nabla\psi^* - \psi\nabla^2\psi^*) \\ &= \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*).\end{aligned} \tag{4.24}$$

Na osnovu toga jednakost (4.22) se može napisati u obliku

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}\mathbf{j} = 0. \tag{4.25}$$

Ova relacija je poznata kao *jednačinu kontinuiteta*. Ona se u istoj formi pojavljuje i u drugim oblastima fizike kao što su dinamika fluida i elektromagnetizam. U opštem slučaju jednačina predstavlja zakon održanja za veličine koje opisuju neki tok u sredinama bez izvora i ponora, pri čemu je ρ gustina te veličine, a vektorsko polje $\mathbf{j}$ njen fluks. Veličina na koju se odnosi jednačina kontinuiteta u kvantnoj mehanici je verovatnoća nalaženja čestice u nekom položaju u prostoru u datom trenutku. Prema tome, ako se u nekom delu prostora gustina verovatnoće nalaženja čestice menja ($\partial\rho/\partial t \neq 0$), onda se kao posledica toga javlja "protok" verovatnoće okarakterisan fluksom (gustinom struje) $\mathbf{j}$.

4.1.5 Promena stanja kvantnog sistema

Pored postepene promene stanja u toku vremena (evolucije) koja odražava dinamiku kvantnog sistema i određena je Šredingerovom jednačinom, videli smo da se stanje sistema takođe menja kada se na njemu izvrši neko merenje (v. odeljak 3.4.2). Za razliku od evolucije, ova druga promena je skokovita, nakon čega se sistem nalazi u nekom od svojstvenih stanja merene veličine. Najprihvaćenije objašnjenje za to je interakcija kvantnog sistema sa mernim uređajem (v. odeljak 1.4.6). Ipak, do sada nije predstavljena neka prihvatljiva teorija koja bi mogla da egzaktno opiše mehanizam te promene. Dva moguća tipa promene stanja su, dakle, bitno različita. Šredingerova jednačina jednoznačno određuje stanje sistema u proizvoljnom trenutku ako je ono poznato u početnom trenutku. Ako, međutim, do promene dolazi usled merenja, tada znamo da će sistem preći u neko od svojstvenih stanja merene veličine ali nije moguće predvideti u koje. Moguće je jedino izračunati odgovarajuće verovatnoće prelaza.

U realnim eksperimentima se promena stanja kvantnog sistema obično ostvaruje kombinacijom navedena dva načina. Neka je npr. merenjem veličine A sistem preveden u svojstveno stanje ψ_a u kojem ta veličina ima određenu vrednost a. Ovo stanje nakon toga evoluira (kako to određuje Šredingerova jednačina) i u nekom trenutku, kada odlučimo da ponovimo merenje, sistem će biti u stanju ψ koje je u opštem slučaju različito od ψ_a. Pošto se ovo stanje (kao i bilo koje drugo) može predstaviti kao superpozicija svojstvenih stanja merene veličine, rezultat ponovljenog merenja ne mora biti vrednost a (kao što bi se desilo u ponovljenom merenju izvršenom neposredno nakon prvog merenja), već to mogu biti i druge svojstvene vrednosti veličine A. Prema tome, isključivo evolucijom sistem neće preći iz stanja sa jednom (određenom) vrednošću fizičke veličine u stanje sa drugom vrednošću. Evolucija ustvari kreira nove mogućnosti koje su sadržane u stanju ψ, a proces merenja je taj koji ih ostvaruje (redukcija talasnog paketa).[2]

[2] Ovo je opet interpretacija Kopenhagenške škole. Protivnici ovakvog shvatanja su pokušavali kroz razne misaone eksperimenate (najpoznatiji je tzv. "Šredingerova mačka") da ga dovedu do paradoksa i tako ospore. To, međutim, nije umanjilo dominaciju Kopenhagenške škole među drugim interpretacijama.

4.2 Stacionarna stanja i opšte rešenje Šredingerove jednačine

Posmatrajmo sistem čiji hamiltonijan ne zavisi od vremena ($\partial\hat{H}/\partial t = 0$). Takav sistem se naziva konzervativnim i njegova energija u klasičnoj mehanici predstavlja konstantu kretanja. Glavni cilj ovog poglavlja, pored određivanja opšteg rešenja Šredingerove jednačine, biće nalaženje rešenja koja opisuju stanja kvantnih sistema sa određenom vrednošću energije.

4.2.1 Razdvajanje promenljivih. Stacionarna stanja

Pretpostavimo da postoje rešenja Šredingerove jednačine (4.1) koja se mogu predstaviti u obliku

$$\psi(\xi, t) = \psi(\xi) f(t). \tag{4.26}$$

Pokazaćemo da ova faktorizacija u slučaju konzervativnih sistema dovodi do razdvajanja promenljivih ξ i t u jednačini.

Zamenjujući u Šredingerovoj jednačini nepoznatu funkciju ψ proizvodom funkcija (4.26), te imajući u vidu da operator $\partial/\partial t$ deluje samo na funkciju $f(t)$, a Hamiltonijan $\hat{H}$ (pošto ne zavisi od vremena) samo na $\psi(\xi)$, jednačina se može napisati u obliku

$$i\hbar\psi(\xi)\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = f(t)\hat{H}\psi(\xi), \tag{4.27}$$

odnosno

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\psi(\xi)}\hat{H}\psi(\xi). \tag{4.28}$$

Uočimo da leva strana poslednje jednačine zavisi samo od vremenske promenljive t, a desna samo od kordinata ξ. Pošto se dve funkcije različitih promenljivih ne mogu izjednačiti osim u specijalnom slučaju kada su te funkcije konstante, sledi da i desna i leva strana jednačine (4.28) treba da budu jednake istoj (tzv. separacionoj) konstanti koju ćemo obeležiti sa c. Ova jednačina se na taj način razlaže na dve nezavisne jednačine

$$\hat{H}\psi(\xi) = c\,\psi(\xi), \tag{4.29}$$

$$\frac{\mathrm{d}f}{f(t)} = -\frac{i}{\hbar}c\,\mathrm{d}t. \tag{4.30}$$

Prva od dobijenih jednačina predstavlja svojstveni problem hamiltonijana. Kod konzervativnih sistema $\hat{H}$ je operator energije, a njegove svojstvene vrednosti, tzv. *svojstvene energije*, su moguće energije sistema. Prema tome, vrednosti konstante c mogu da budu samo svojstvene energije E. Ako sa ψ_E označimo odgovarajuće svojstvene funkcije hamiltonijana, jednačina (4.29) glasi

$$\hat{H}\psi_{_E}(\xi) = E\,\psi_{_E}(\xi). \tag{4.31}$$

Ova jednačina se naziva *vremenski nezavisna* Šredingerova jednačina. Ona se, analogno svojstvenom problemu drugih operatora (v. odeljak 3.4.3), rešava uz date granične uslove tako da rešenja u mnogim slučajevima (zavisno od tih uslova) postoje samo za određene vrednosti energije E. Prema tome, energijski spektar kvantnog sistema može biti diskretan, neprekidan ili kombinovan. Diskretne svojstvene vrednosti energije, tzv. *energijski nivoi*, se javljaju kada je kretanje sistema ograničeno na konačnu oblast konfiguracionog prostora (tzv. vezano kretanje). Odgovarajuća kvantna stanja se nazivaju *vezana stanja*, a ono sa najnižom energijom se naziva *osnovno stanje*. Stanja koja odgovaraju ostalim energijskim nivoima se nazivaju *pobuđena stanja*.

Zamenjujući u jednačini (4.30) konstantu c vrednošću neke od svojstvenih energija E, a zatim integraljenjem jednačine, dobijamo $\ln f = -\frac{i}{\hbar}Et$, odnosno

$$f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \tag{4.32}$$

Prema tome, rešenja Šredingerove jednačine koja se mogu predstaviti u obliku proizvoda funkcije koordinata i funkcije vremena glase

$$\psi(\xi, t) = \psi_{_E}(\xi)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \tag{4.33}$$

Ova funkcija je, kao i sama funkcija $\psi_{_E}$, svojstvena funkcija hamiltonijana i, ukoliko je kvadratno integrabilna, predstavlja stanje kvantnog sistema sa određenom vrednošću energije. Stanja sa određenom vrednošću energije se nazivaju *stacionarna stanja*. Ovaj naziv sledi iz osobina koje navodimo u nastavku.

Iz izraza (4.33) vidimo da je zavisnost talasne funkcije stacionarnog stanja od vremena predstavljena faktorom $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ i na taj način jednoznačno određena vrednošću energije koju kvantni sistem ima u tom stanju. S druge strane, ovaj faktor uzima vrednosti koje leže na jediničnom krugu u kompleksnoj ravni ($|e^{-\frac{i}{\hbar}Et}| = 1$), odakle prizilazi da talasna funkcija (4.33) u bilo kom trenutku t predstavlja isto stanje (analogno kao kod množenja proizvoljnim faznim faktorom, v. odeljke 3.1.3 i 3.1.5). Prema tome, stanje opisano talasnom funkcijom (4.33) se u suštini ne menja sa vremenom.

Iz poslednjeg zaključka sledi da u stacionarnim stanjima gustina verovatnoće, gustina struje verovatnoće, srednja vrednost proizvoljne fizičke veličine čiji operator ne zavisi od vremena, kao i verovatnoća dobijanja određene vrednosti fizičke veličine, ne zavise od vremena. Uzmimo kao primer gustinu verovatnoće. Ako je ψ stacionarno stanje, imamo

$$\rho = \psi^*\psi = \psi_{_E}^* e^{\frac{i}{\hbar}Et}\psi_{_E}\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \psi_{_E}^*\psi_{_E} = \text{const.} \tag{4.34}$$

Zamenjujući izraz (4.33) i njegov kompleksno konjugovani izraz u formulu (4.23), analogno se dobija i za gustinu struje verovatnoće, Takođe, ako je $\hat{A}$ opservabla koja ne zavisi od vremena, njena srednja vrednost u stacionarnom stanju ψ će biti

$$\langle A\rangle = \int \psi^*(\xi, t)\,\hat{A}\,\psi(\xi, t)\,\mathrm{d}\xi = \int \psi_{_E}^*(\xi)\,\hat{A}\,\psi(\xi)_{_E}\,\mathrm{d}\xi = \text{const.} \tag{4.35}$$

Napomenimo ovde da veličina A može da ima određenu vrednost u stacionarnim stanjima ukoliko komutira sa hamiltonijanom (v. odeljak 3.4.9). Konačno, verovatnoća

dobijanja određene vrednosti fizičke veličine A (neka je to vrednost a_n iz diskretnog spektra kojoj odgovara svojstvena funkcija ψ_n) u stacionarnom stanju ψ iznosi

$$\mathcal{P}_n = \left| \int \psi^*(\xi,t)\psi_n(\xi)\,\mathrm{d}\xi \right|^2 = \left| \int \psi_E^*(\xi)\psi_n(\xi)\,\mathrm{d}\xi \right|^2 = \text{const.} \tag{4.36}$$

4.2.2 Opšte rešenje Šredingerove jednačine

Pokazaćemo da se opšte rešenje Šredingerove jednačine, zahvaljujući njenoj linearnosti, može predstaviti kao superpozicija rešenja te jednačine sa određenim vrednostima energije (stacionarnih stanja).

Pretpostavimo prvo da hamiltonijan $\hat{H}$ ima čisto diskretan i nedegenerisan spektar $\{E_n|\,\forall n\}$. Opšte rešenje Šredingerove jednačine (4.1) se tada može predstaviti u obliku

$$\psi(\xi,t) = \sum_n c_n\,\psi_n(\xi)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}, \tag{4.37}$$

gde su ψ_n svojstvene funkcije koje odgovaraju svojstvenim energijama E_n i čine svojstveni bazis hamiltonijana. Uočimo da c_n predstavljaju koeficijente u razvoju opšteg rešenja u trenutku $t = 0$ po svojstvenom bazisu, tj. $\psi(\xi,0) = \sum_n c_n\,\psi_n(\xi)$. Zamenjujući razvoj (4.37) u Šredingerovu jednačinu (4.1), lako se proverava da je on zaista njeno rešenje. Dobija se

$$i\hbar \sum_n c_n\,\psi_n(\xi)\frac{\partial}{\partial t}\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = \sum_n c_n \hat{H}\psi_n(\xi)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}. \tag{4.38}$$

Nakon delovanja operatora $\partial/\partial t$ i $\hat{H}$ imamo

$$i\hbar \sum_n c_n\,\psi_n(\xi)\left(-\frac{i}{\hbar}E_n\right)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = \sum_n c_n E_n\psi_n(\xi)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}, \tag{4.39}$$

što predstavlja identitet.

Ukoliko je spektar $\{E_n|\,\forall n\}$ diskretan ali degenerisan, hamiltonijan treba dopuniti do kompletnog skupa kompatibilnih opservabli (v. odeljak 3.4.11) i na taj način dobiti zajednički svojstveni bazis $\{\psi_{nk}|\,k = 1,\ldots d_n;\,\forall n\}$. Ovde je d_n multiplicitet nivoa E_n, a kvantni broj k prebrojava različite funkcije ψ_{nk} koje odgovaraju tom nivou. Na analogan način kao u pretodnom slučaju može se pokazati da je opšte rešenje Šredingerove jednačine u ovom slučaju

$$\psi(\xi,t) = \sum_n \sum_{k=1}^{d_n} c_{nk}\,\psi_{nk}(\xi)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}, \tag{4.40}$$

pri čemu c_{nk} predstavljaju koeficijente u razvoju ovog rešenja u trenutku $t = 0$ po zajedničkom svojstvenom bazisu, tj. $\psi(\xi,0) = \sum_n \sum_{k=1}^{d_n} c_{nk}\,\psi_{nk}(\xi)$.

Ako je spektar hamiltonijana $\hat{H}$ neprekidan (ograničićemo se radi jednostavnosti opet na nedegenerisan slučaj), onda se opšte rešenje Šredingerove jednačine (4.1)

može predstaviti u obliku

$$\psi(\xi,t) = \int c(E)\,\psi_E(\xi)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\,\mathrm{d}E, \tag{4.41}$$

gde su ψ_E svojstvene funkcije hamiltonijana koje odgovaraju svojstvenim energijama E. Kao i u slučaju diskretnog spektra, $c(E)$ su koeficijenti u razvoju opšteg rešenja u trenutku $t = 0$ po svojstvenom bazisu, tj. $\psi(\xi,0) = \int c(E)\,\psi_E(\xi)\,\mathrm{d}E$.

U stanjima (4.37), (4.40) i (4.41) energija u opštem slučaju nema određenu vrednost i, prema tome, ova stanja nisu stacionarna. Gustina verovatnoće u nestacionarnim stanjima zavisi od vremena. Npr. u stanju (4.37) će biti

$$\begin{aligned}\rho &= \psi^*(\xi,t)\psi(\xi,t) = \sum_n c_n^*\psi_n^*(\xi)\,e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}\sum_{n'} c_{n'}\psi_{n'}(\xi)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n'}t}\\ &= \sum_n\sum_{n'} c_n^* c_{n'}\,\psi_n^*(\xi)\psi_{n'}(\xi)\,e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_{n'})t}.\end{aligned} \tag{4.42}$$

U nestacionarnim stanjima, medjutim, srednja vrednost energije ne zavisi od vremena. Tako u stanju (4.37) imamo

$$\begin{aligned}\langle E\rangle &= \int \psi^*(\xi,t)\,\hat{H}\psi(\xi,t)\,\mathrm{d}\xi\\ &= \int \sum_n c_n^*\psi_n^*(\xi)\,e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}\,\hat{H}\sum_{n'} c_{n'}\psi_{n'}(\xi)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n'}t}\,\mathrm{d}\xi\\ &= \sum_n\sum_{n'} c_n^* c_{n'}\,e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_{n'})t}\int \psi_n^*(\xi)\,\hat{H}\psi_{n'}(\xi)\,\mathrm{d}\xi\\ &= \sum_n\sum_{n'} c_n^* c_{n'}\,e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_{n'})t}E_{n'}\delta_{nn'} = \sum_n |c_n|^2\,E_n.\end{aligned} \tag{4.43}$$

4.2.3 Promena srednje vrednosti fizičke veličine sa vremenom

U prethodnom odeljku smo pokazali da se u stacionarnim stanjima srednja vrednost fizičke veličine, koja ne zavisi eksplicitno od vremena, ne menja sa vremenom. Ispitaćemo kako se ova srednja vrednost menja u slučaju proizvoljnog stanja. Neka je $\langle A\rangle = (\psi, \hat{A}\psi)$ srednja vrednost fizičke veličine A u stanju ψ. Tada je

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle &\equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\psi,\hat{A}\psi\right) = \left(\frac{\partial\psi}{\partial t},\hat{A}\psi\right) + \left(\psi,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right) + \left(\psi,\hat{A}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)\\ &= \left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi,\hat{A}\psi\right) + \left(\psi,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right) + \left(\psi,\hat{A}\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi\right)\\ &= -\frac{1}{i\hbar}\left(\psi,\hat{H}\hat{A}\psi\right) + \left(\psi,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right) + \frac{1}{i\hbar}\left(\psi,\hat{A}\hat{H}\psi\right)\\ &= \frac{1}{i\hbar}\left(\psi,[\hat{A},\hat{H}]\psi\right) + \left(\psi,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right).\end{aligned} \tag{4.44}$$

Posledni izraz možemo pisati u obliku

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle[\hat{A},\hat{H}]\right\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle. \tag{4.45}$$

Ova jednačina predstavlja zakon kretanja za srednje vrednosti.[3]

Ukoliko fizička veličina C ne zavisi eksplicitno od vremena, a operator te veličine komutira sa hamitonijanom ($[\hat{C},\hat{H}] = 0$), iz jednačine (4.45) neposredno sledi da je u tom slučaju

$$\frac{\mathrm{d}\langle C\rangle}{\mathrm{d}t} = 0. \tag{4.46}$$

Po analogiji sa klasičnom mehanikom, veličinu C tada nazivamo konstantom kretanja. Ako se konzervativan sistem nalazi u stanju koje je opisano nekom zajedničkom svojstvenom funkcijom od $\hat{H}$ i $\hat{C}$, to stanje se neće menjati u toku vremena, a energija i veličina C, tačnije njena svojstvena vrednost c, ostaju potpuno određene i konstantne u toku vremena. Svojstvene vrednosti c ili indeksi koji ih prebrojavaju se nazivaju "dobri kvantni brojevi".

4.3 Jednodimenzioni kvantni sistemi. Primeri rešavanja Šredingerove jednačine

Jednodimenzionim sistemima u fizici nazivamo sisteme čija se dinamika može svesti na jedan stepen slobode. Ovakvi sistemi su od interesa za fiziku ne samo kao jednostavni modeli koji se koriste za proučavanje opštih osobina kvantnih sistema, već i zbog toga što se složeniji sistemi u nekim slučajevima mogu svesti na sisteme sa jednim stepenom slobode ili, ukoliko su separabilni u nekim koordinatama, mogu se razložiti na onoliko jednodimenzionih problema koliko sistem ima stepeni slobode. Ovde ćemo razmotriti nekoliko primera za koje je moguće egzaktno rešiti vremenski nezavisnu Šredingerovu jednačinu. Ona se za sisteme sa jednim stepenom slobode (koordinatu ćemo označiti sa x) svodi na oblik

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\,\psi(x) = E\,\psi(x). \tag{4.47}$$

Talasne funkcije $\psi(x)$ koje su rešenja ove jednačine opisuju stacionarna stanja jednodimenziog sistema u kojima on ima određene vrednosti energije E, koje se takođe dobijaju iz te jednačine.

[3] Uzimajući za veličinu A osnovne dinamičke promenljive $\mathbf{r}$ i $\mathbf{p}$, jednačina (4.45) daje tzv. Erenfestove jednačine (P. Ehrenfest): $m\,\mathrm{d}\langle\mathbf{r}\rangle/\mathrm{d}t = \langle\mathbf{p}\rangle$, $\mathrm{d}\langle\mathbf{p}\rangle/\mathrm{d}t = \langle-\nabla V(\mathbf{r})\rangle$. Iako ove jednačine podsećaju na klasične jednačine kretanja, srednje vrednosti $\langle\mathbf{r}\rangle$ i $\langle\mathbf{p}\rangle$ se u opštem slučaju ne menjaju po istom zakonu kao klasične promenljive $\mathbf{r}$ i $\mathbf{p}$. Da bi se to desilo, u drugoj jednačini umesto $\langle-\nabla V(\mathbf{r})\rangle$ treba da stoji $-\nabla V(\langle\mathbf{r}\rangle)$. Pokazuje se da se za izvesne tipove potencijala (npr. za slobodnu česticu, česticu pod uticajem konstantne sile ili za harmonijski oscilator) ova dva izraza poklapaju i u tom slučaju su Erenfestove jednačine ekvivalentne klasičnim jednačinama kretanja.

Jednačinu (4.47) je u cilju rešavanja pogodno napisati u obliku

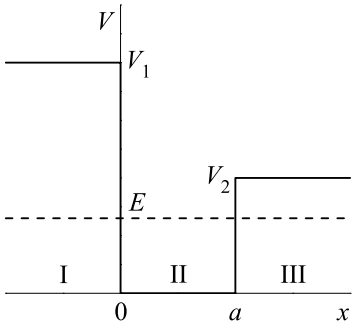
$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right]\psi(x) = 0, \tag{4.48}$$

koji ćemo koristiti u narednim primerima.

4.3.1 Čestica u asimetričnoj pravougaonoj potencijalnoj jami

Posmatrajmo česticu mase m koja se kreće u jednodimenzionoj pravougaonoj potencijalnoj jami čiji je oblik definisan na sledeći način (slika 4.1)

$$V(x) = \begin{cases} V_1, & x < 0 \quad \text{(oblast I)}, \\ 0, & 0 \le x \le a \quad \text{(oblast II)}, \\ V_2, & x > a \quad \text{(oblast III)}. \end{cases} \tag{4.49}$$



Slika 4.1. Primer pravougaone potencijalne jame oblika (4.49) (puna linija). Horizontalna isprekidana linija predstavlja energiju $E < V_2$.

Analiziraćemo slučaj kada je $V_2 < V_1$ i $0 < E < V_2$. Ako ovaj problem posmatramo sa stanovišta klasične mehanike, s obzirom da ukupna energija E (zbog pozitivnosti kinetičke energije) ne može biti manja od potencijalne, sledi da je kretanje čestice ograničeno na oblast II. U kvantnomehaničkom prilazu ovom slučaju odgovaraju vezana stanja čestice. Talasne funkcije koje opisuju ova stanja su rešenja Šredingerove jednačine (4.48) za potencijal (4.49) koja odgovaraju energijama $E < V_2$.

Kada je potencijal prekidna funkcija koja je u različitim intervalima duž koordinatne ose (ovde su to oblasti I, II i III) definisana različitim izrazima, onda se rešenja jednačine (4.48) dobijaju tako što se jednačina rešava u svakom od intervala zasebno sa drugačijim izrazom za potencijal, a zatim se rešenja dobijena u intervalima spajaju ("sašivaju") u celovita rešenja, zahtevajući pri tome da ona budu neprekidne i diferencijabilne funkcije za sve vrednosti x.

Primenjujući navedni postupak na problem čestice u potencijalu (4.49), rešenja u oblastima I, II i III će biti rešenja jednačina

$$\frac{d^2\psi_{\mathrm{I}}}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_1)\psi_{\mathrm{I}} = 0, \tag{4.50}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_{\mathrm{II}}}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_{\mathrm{II}} = 0, \tag{4.51}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_{\mathrm{III}}}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_2)\psi_{\mathrm{III}} = 0, \tag{4.52}$$

a talasne funkcije vezanih stanja će biti oblika

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_{\mathrm{I}}(x), & x < 0, \\ \psi_{\mathrm{II}}(x), & 0 \le x \le a, \\ \psi_{\mathrm{III}}(x), & x > a, \end{cases} \tag{4.53}$$

pod uslovom da se funkcije ψ_{I}, ψ_{II}, ψ_{III} "glatko sašivaju" na granicama oblasti.

Uvodeći oznake $\varkappa_1^2 = 2m(V_1 - E)/\hbar^2$, $k^2 = 2mE/\hbar^2$, $\varkappa_2^2 = 2m(V_2 - E)/\hbar^2$, koje su u slučaju $0 < E < V_2$ pozitivne veličine, jednačine (4.50)-(4.52) uzimaju prostiji oblik

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_{\mathrm{I}}}{\mathrm{d}x^2} - \varkappa_1^2\psi_{\mathrm{I}} = 0, \tag{4.54}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_{\mathrm{II}}}{\mathrm{d}x^2} + k^2\psi_{\mathrm{II}} = 0, \tag{4.55}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_{\mathrm{III}}}{\mathrm{d}x^2} - \varkappa_2^2\psi_{\mathrm{III}} = 0. \tag{4.56}$$

Poznato je da su opšta rešenja ovih diferencijalnih jednačina[4]

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = c_1 e^{\varkappa_1 x} + c_2 e^{-\varkappa_1 x}, \tag{4.57}$$

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = c_3 \sin kx + c_4 \cos kx, \tag{4.58}$$

$$\psi_{\mathrm{III}}(x) = c_5 e^{\varkappa_2 x} + c_6 e^{-\varkappa_2 x}. \tag{4.59}$$

Pošto talasne funkcije za sve vrednosti x moraju da budu konačne funkcije, to mora da važi i za rešenja ψ_{I}, ψ_{II}, ψ_{III} u njihovim oblastima. Uočimo, međutim, da kada $x \to -\infty$ (leva granica oblasti I) drugi član u izrazu (4.57) divergira, a kada $x \to +\infty$ (desna granica oblasti III) divergira prvi član u izrazu (4.59). Rešenja (4.57) i (4.59) će biti konačne funkcije u oblastima I, odnosno III, jedino ako uzmemo da su konstante $c_2 = c_5 = 0$, tj. da su $\psi_{\mathrm{I}} = c_1 e^{\varkappa_1 x}$ i $\psi_{\mathrm{III}} = c_6 e^{-\varkappa_2 x}$. Uočimo da sa ovim izborom

[4] Strogo matematički, rešenja (4.57)-(4.59) dobijamo tako što jednačine (4.54)-(4.56) napišemo u obliku sa bezdimenzionom promenljivom $\xi = x/a$. Tada je npr. rešenje u oblasti I $\psi_{\mathrm{I}}(\xi) = c_1 e^{\kappa_1 \xi} + c_2 e^{-\kappa_1 \xi}$, gde je $\kappa_1 = a\varkappa_1$, što vraćanjem smena daje izraz (4.57).

celovita rešenja Šredingerove jednačine imaju sledeće asimptotsko ponašanje

$$\lim_{x\to-\infty}\psi(x)\equiv\lim_{x\to-\infty}\psi_{\mathrm{I}}(x)=0, \tag{4.60}$$

$$\lim_{x\to+\infty}\psi(x)\equiv\lim_{x\to+\infty}\psi_{\mathrm{III}}(x)=0. \tag{4.61}$$

Da bi rešenja $\psi(x)$, data u obliku (4.53), bile neprekidne i diferencijabilne funkcije u tačkama $x=0$ i $x=a$ (a time i za sve vrednosti x), mora da važi

$$\psi_{\mathrm{I}}(0)=\psi_{\mathrm{II}}(0),\quad \left(\frac{d\psi_{\mathrm{I}}}{dx}\right)_{x=0}=\left(\frac{d\psi_{\mathrm{II}}}{dx}\right)_{x=0}, \tag{4.62}$$

$$\psi_{\mathrm{II}}(a)=\psi_{\mathrm{III}}(a),\quad \left(\frac{d\psi_{\mathrm{II}}}{dx}\right)_{x=a}=\left(\frac{d\psi_{\mathrm{III}}}{dx}\right)_{x=a}. \tag{4.63}$$

Kada se ovi uslovi (tzv. uslovi neprekidnosti) primene na rešenja (4.57), (4.58), (4.57), oni daju sledeće relacije među konstantama c_1, c_3, c_4, c_6

$$c_1=c_4,\quad c_1\varkappa_1=c_3k, \tag{4.64}$$

$$c_3\sin ka+c_4\cos ka=c_6e^{-\varkappa_2a},\quad c_3k\cos ka-c_4k\sin ka=-\varkappa_2c_6e^{-\varkappa_2a}. \tag{4.65}$$

Eliminacijom konstanti c_3 i c_4, dobija se homogen sistem od dve linearne jednačine sa dve nepoznate (c_1 i c_6)

$$\begin{aligned} &c_1\left(\frac{\varkappa_1}{k}\sin ka+\cos ka\right)-c_6e^{-\varkappa_2a}=0,\\ &c_1(\varkappa_1\cos ka-k\sin ka)+c_6\varkappa_2e^{-\varkappa_2a}=0. \end{aligned} \tag{4.66}$$

Sistem ima netrivijalna rešenja ako je determinanta sistema jednaka nuli

$$\begin{vmatrix} \frac{\varkappa_1}{k}\sin ka+\cos ka & -e^{-\varkappa_2a}\\ \varkappa_1\cos ka-k\sin ka & \varkappa_2e^{-\varkappa_2a}\end{vmatrix}=0, \tag{4.67}$$

što u razvijenom obliku glasi

$$\left(\frac{\varkappa_1}{k}\sin ka+\cos ka\right)\varkappa_2e^{-\varkappa_2a}+(\varkappa_1\cos ka-k\sin ka)e^{-\varkappa_2a}=0. \tag{4.68}$$

Sređivanjem ovog izraza dobijamo $(\varkappa_1\varkappa_2/k-k)\sin ka+(\varkappa_1+\varkappa_2)\cos ka=0$, odnosno

$$\operatorname{ctg}ka=\frac{k^2-\varkappa_1\varkappa_2}{k(\varkappa_1+\varkappa_2)} \tag{4.69}$$

ili eksplicitno

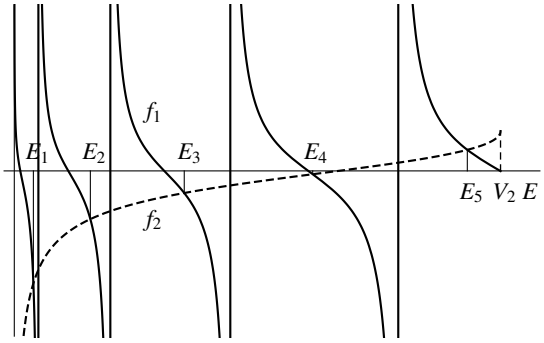
$$\operatorname{ctg}\frac{\sqrt{2mE}\,a}{\hbar}=\frac{E-\sqrt{(V_1-E)(V_2-E)}}{\sqrt{E}(\sqrt{V_1-E}+\sqrt{V_2-E})}. \tag{4.70}$$

Prema tome, rešenja Šredingerove jednačine ψ će biti neprekidne i diferencijabilne funkcije samo ako odgovarajuće energije E zadovoljavaju poslednju jednačinu. Pošto su ovakva rešenja jedina koja su fizički prihvatljiva, proizilazi da jednačina (4.70) određuje moguće energije (energijske nivoe) razmatranog sistema.

Rešenja jednačine (4.70), s obzirom da se radi o transcedentnoj jednačini, nije moguće predstaviti u analitičkom obliku. Ona se, međutim, za konkretne vrednosti parametara sistema (m, a, V_1 i V_2) mogu odrediti koristeći numeričke metode, što zahvaljujući računarima danas ne predstavlja težak zadatak. Rešenja se takođe mogu približno odrediti grafičkim metodom koji ćemo ovde opisati. U tom cilju uvedimo funkcije

$$f_1(E) = \operatorname{ctg} \frac{\sqrt{2mE}\, a}{\hbar}, \quad f_2(E) = \frac{E - \sqrt{(V_1 - E)(V_2 - E)}}{\sqrt{E}(\sqrt{V_1 - E} + \sqrt{V_2 - E})} \tag{4.71}$$

i uočimo da se jednačina (4.70) svodi na uslov $f_1(E) = f_2(E)$. Prema tome, ako ove funkcije predstavimo na istom grafiku, rešenja jednačine će se nalaziti na mestima preseka funkcija (slika 4.2).



Slika 4.2. Tipični oblici funkcija $f_1(E)$ (puna linija) i $f_2(E)$ (isprekidana linija) u slučaju potencijala (4.49). Energijske nivoe sistema predstavljaju vrednosti na apscisi (E-osa) koje odgovaraju tačkama preseka funkcija.

Navešćemo neke karakteristike funkcija $f_1(E)$ i $f_2(E)$. Funkcija $f_1(E)$ je prekidna, a tačke prekida su određene uslovom $\sqrt{2mE}\, a/\hbar = n\pi$, $n = 0, 1, 2, \ldots$ iz kojeg sledi da odgovaraju vrednostima energije

$$E_\infty = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2}. \tag{4.72}$$

Nule funkcije $f_1(E)$ se određuju iz uslova $\sqrt{2mE}\, a/\hbar = (2k + 1)\pi/2$, $k = 0, 1, 2, \ldots$ koji daje sledeće vrednosti energije

$$E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2(2k + 1)^2}{8ma^2}. \tag{4.73}$$

Funkcija $f_2(E)$ je definisana i neprekidna u intervalu $0 < E \leq V_2$. Vrednosti funkcije na granicama intervala su

$$\lim_{E\to 0} f_2(E) = -\infty, \quad \lim_{E\to V_2} f_2(E) = \sqrt{\frac{V_2}{V_1 - V_2}}. \tag{4.74}$$

Nula funkcije $f_2(E)$ se nalazi iz uslova $E - \sqrt{(V_1 - E)(V_2 - E)} = 0$. Odgovarajuća vrednost energije je

$$E_0 = \frac{V_1 V_2}{V_1 + V_2}. \tag{4.75}$$

Pošto je funkcija $f_2(E)$ definisana u intervalu $0 < E \leq V_2$, sledi da se i energije vezanih stanja javljaju u tom intervalu. Pri tome, da bi sistem imao bar jedno vezano stanje, neophodno je da se funkcije $f_1(E)$ i $f_2(E)$ seku bar u jednoj tački. S obzirom da je $\lim_{E\to 0} f_1(E) = \infty$, a $\lim_{E\to 0} f_2(E) = -\infty$, tačka preseka postoji ako je $f_2(V_2) > f_1(V_2)$, tj.

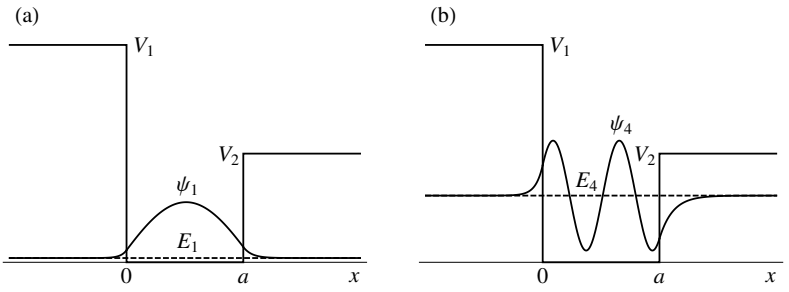
$$\sqrt{\frac{V_2}{V_1 - V_2}} > \operatorname{ctg} \frac{\sqrt{2mV_2}\, a}{\hbar}. \tag{4.76}$$

Neka su $E_1, E_2, \ldots$ energijski nivoi dobijeni iz uslova $f_1(E) = f_2(E)$. Za ove vrednosti energija sistem jednačina (4.66)) ima rešenje, tj. koeficijent c_6 se jednoznačno izražava preko koeficijenta c_1

$$c_6 = c_1 \left(\frac{\varkappa_1}{k} \sin ka + \cos ka \right) e^{\varkappa_2 a}. \tag{4.77}$$

Konačno c_1 se određuje iz uslova normiranja $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = 1$, koji možemo napisati u obliku

$$\int_{-\infty}^{0} |\psi_{\mathrm{I}}(x)|^2 \mathrm{d}x + \int_{0}^{a} |\psi_{\mathrm{II}}(x)|^2 \mathrm{d}x + \int_{a}^{\infty} |\psi_{\mathrm{III}}(x)|^2 \mathrm{d}x = 1. \tag{4.78}$$



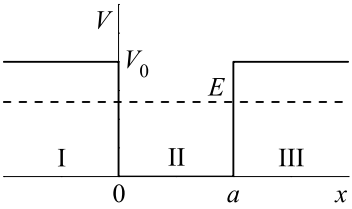
Slika 4.3. (a) Najniži energijski nivo E_1 i odgovarajuća talasna funkcija ψ_1 koja opisuje osnovno stanje čestice u jami (4.49). (b) Četvrti energijski nivo i odgovarajuća talasna funkcija ψ_4.

Oblik talasnih funkcija $\psi_1(x)$ i $\psi_4(x)$ koje opisuju osnovno, odnosno četvrto vezano stanje sistema (po kriterijumu rastućih energija), prikazan je na slici 4.3. Za vezana stanja gustina verovatnoće nalaženja čestice $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ je najveća unutar jame. Uočimo, međutim, da postoji konačna verovatnoća da se čestica nađe i u oblasti koja je klasično zabranjena ($x < 0$ ili $x > a$), ali $\rho(x)$ brzo opada sa udaljavanjem od jame.

4.3.2 Pravougaona potencijalna jama sa simetričnim zidovima

Pravougaona potencijalna jama sa simetričnim zidovima se dobija iz prethodnog slučaja ako izaberemo $V_1 = V_2 = V_0$. Prema tome, njen oblik je

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le a, \\ V_0, & x < 0 \vee x > a. \end{cases} \tag{4.79}$$



Slika 4.4. Primer pravougaone potencijalne jame sa simetričnim zidovima (puna linija). Horizontalna isprekidana linija predstavlja energiju $E < V_0$.

Vezanim stanjima čestice koja se nalazi u ovoj jami odgovaraju energije $E < V_0$. Šredingerova jednačina se rešava analogno kao u slučaju asimetrične jame. U tom cilju x-osu delimo na oblasti I, II i III i u njima rešavamo jednačine (4.50)-(4.52) u kojima je $V_1 = V_2 = V_0$. Rešenja su, prema tome, oblika (4.57)-(4.59) u kojima je $\varkappa_1 = \varkappa_2 = \varkappa$, pri čemu je $\varkappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$ i $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Uzimajući u obzir asimptotske uslove $\lim_{x\to\pm\infty} \psi(x) = 0$, rešenja su

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = c_1 e^{\varkappa x}, \tag{4.80}$$

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = c_3 \sin kx + c_4 \cos kx, \tag{4.81}$$

$$\psi_{\mathrm{III}}(x) = c_6 e^{-\varkappa x}. \tag{4.82}$$

Primenjujući uslove neprekidnosti i sprovodeći istu proceduru kao u prethodnom slučaju, dobija se uslov $f_1(E) = f_2(E)$ za moguće energije sistema, gde je sada

$$f_1(E) = \operatorname{ctg} \frac{\sqrt{2mE}\, a}{\hbar}, \quad f_2(E) = \frac{2E - V_0}{2\sqrt{E}\sqrt{V_0 - E}}. \tag{4.83}$$

Uočimo da je funkcija $f_1(E)$ ista kao u prethodnom slučaju. Funkcija $f_2(E)$ je definisana u intervalu energija $0 < E \le V_0$, pri čemu je

$$\lim_{E\to 0} f_2(E) = -\infty, \quad \lim_{E\to V_0} f_2(E) = +\infty, \tag{4.84}$$

a nula funkcije je na sredini intervala definisanosti, tj. $E_0 = V_0/2$. Na osnovu druge od graničnih vrednosti sledi da je uslov $f_2(V_0) > f_2(V_0)$ uvek ispunjen, te prema tome simetrična pravougaona jama ima bar jedno vezano stanje.

4.3.3 Beskonačno duboka pravougaona potencijalna jama

Beskonačno duboka pravougaona potencijalna jama je definisana potencijalom oblika

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le a, \\ \infty, & x < 0 \vee x > a. \end{cases} \tag{4.85}$$

Stacionarna stanja čestice u ovoj jami se određuje rešavanjem vremenski nezavisne Šredingerove jednačine u oblasti $0 \le x \le a$. U toj oblasti jednačina ima oblik

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0, \tag{4.86}$$

odnosno

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \tag{4.87}$$

gde je $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Opšte rešenje ove jednačine je

$$\psi(x) = c_1 \sin kx + c_2 \cos kx. \tag{4.88}$$

Pošto je potencijal na zidovima jame beskonačan, čestica ne može da napusti jamu, pa na granicama oblasti talasna funkcija mora biti jedaka nuli, tj. $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Ovi uslovi daju $c_2 = 0$ i $c_1 \sin ka + c_2 \cos ka = 0$, što se svodi na $c_1 \sin ka = 0$. Poslednji uslov je zadovoljen jedino ako je $ka = n\pi$, gde je n ceo broj. Prema tome, moguća stanja i energije čestice su

$$\psi_n(x) = c_1 \sin \frac{n\pi}{a}x, \quad E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4.89}$$

Slučaj $n = 0$ se ne uzima u obzir jer je tada $\psi(x) = 0$.

Uočimo da beskonačno duboku pravougaonu potencijalnu jamu možemo tretirati i kao specijalni slučaj jame sa simetričnim zidovima kada $V_0 \to \infty$. Energijski nivoi se dakle mogu dobiti i iz uslova $f_1(E) = f_2(E)$, pri čemu ovde $f_2(E) \to -\infty$ za sve vrednosti energije E. Prema tome, taj uslov sada ima oblik

$$\operatorname{ctg} \frac{\sqrt{2mE}\,a}{\hbar} = -\infty, \tag{4.90}$$

odakle sledi $ka \equiv \sqrt{2mE}\,a/\hbar = n\pi$, što daje izraz za energiju (4.89).

Ako zahtevamo da talasna funkcija bude normirana, imamo

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = \int_0^a |\psi|^2 dx = |c_1|^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a}x\, dx = \frac{|c_1|^2}{2}a, \tag{4.91}$$

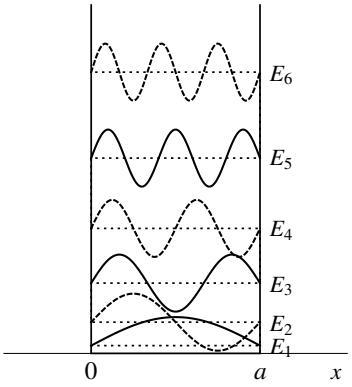
odakle je $c_1 = \sqrt{2/a}$. Prema tome, normirane talasne funkcije su[5]

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (0 \le x \le a), \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4.92}$$

Ove funkcije su uzajamno ortogonalne

$$\int_0^a \psi_n^*(x)\psi_{n'}(x) = \delta_{nn'}, \tag{4.93}$$

a svakom energijskom nivou E_n odgovara jedna talasna funkcija ψ_n, tj. spektar je nedegenerisan.



Slika 4.5. Nekoliko najnižih energijskih nivoa beskonačno duboke pravougaone potencijalne jame (tačkaste horizontalne linije) i odgovarajuće talasne funkcije (parne – pune linije, neparne – isprekidane linije).

Obratimo sada pažnju na činjenicu da su potencijali (4.79) i (4.85) simetrični u odnosu na tačku $x = a/2$. Ako izvršimo translaciju $x \to x - a/2$, centar jame će biti lociran u koordinatnom početku ($x = 0$), a zidovi će biti u tačkama $x = \pm a/2$. Potencijali su tada invarijantni pod transformacijom refleksije u odnosu na koordinatni početak ($x \to -x$), tj. biće parne funkcije ($V(-x) = V(x)$). Kao posledica toga talasne funkcije čestice u ovim potencijalima imaju određenu parnost, što znači da mogu biti ili parne funkcije (za koje važi $\psi(-x) = \psi(x)$) ili neparne funkcije (za koje je $\psi(-x) = -\psi(x)$). Talasne funkcije za nekoliko najnižih energijskih nivoa beskonačno duboke pravougaone potencijalne jame su prikazane na slici 4.5.

[5]Izvan jame je $\psi(x) = 0$, što znači da je funkcija u tačkama $x = 0$ i $x = a$ neprekidna ali nije diferencijabilna. Podsetimo se, međutim, da se u tačkama u kojima potencijal ima singularitete uslov diferencijabilnosti talasnih funkcija ne zahteva (v. poslednji pasus u odeljku 2.1.5).

4.3.4 Potencijalni prag

Potencijalni prag visine V_0 definišemo na sledeći način

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \quad \text{(oblast I)}, \\ V_0, & x \geq 0 \quad \text{(oblast II)}. \end{cases} \tag{4.94}$$

Sa stanovišta klasične mehanike, kretanje čestice u ovakvom potencijalu nije vezano jer u slučaju $E < V_0$ ona može da se neograničeno kreće u negativnom smeru x-ose, a u slučaju $E > V_0$ u oba smera. U kvantnomehaničkom prilazu ovom slučaju odgovaraju nevezana stanja (stanja kontinuuma) čestice. Talasne funkcije koje opisuju ova stanja su rešenja Šredingerove jednačine (4.48) za potencijal (4.94), a dobijaju se "glatkim sašivanjem" rešenja u oblastima I (sa $V = 0$) i II (sa $V = V_0$).

Jednačina u oblasti I glasi

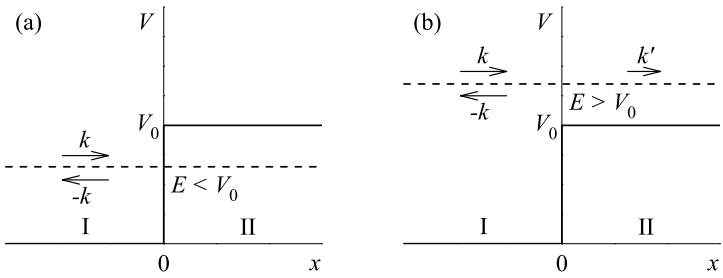
$$\frac{d^2\psi_{\mathrm{I}}}{dx^2} + k^2\psi_{\mathrm{I}} = 0, \tag{4.95}$$

gde je $k^2 = 2mE/\hbar^2$, a njeno opšte rešenje se može napisati u obliku

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \tag{4.96}$$

Napomenimo ovde da se rešenja jednačine (4.95) mogu napisati i u obliku $\psi(x) = c_1 \sin kx + c_2 \cos kx$ (kao za česticu u jami), međutim, kada kretanje nije vezano (kao u ovom slučaju) pogodnije je ta rešenja predstaviti kao superpoziciju tzv. *upadnog* (i) i *reflektovanog* (r) talasa (slika 4.6)

$$\psi_{\mathrm{I}} = \psi_i + \psi_r, \quad \psi_i = Ae^{ikx}, \quad \psi_r = Be^{-ikx}. \tag{4.97}$$



Slika 4.6. Potencijalni prag (pune linije) i energija čestice (isprekidana linija) u slučajevima: (a) $E < V_0$ i (b) $E > V_0$. Strelicama (znakom) je naznačen smer i intenzitet talasnih vektora (talasnih brojeva k, $-k$ i k') koji odgovaraju upadnom, reflektovanom i propušteom talasu.

U oblasti II oblik rešenja zavisi od toga da li je energija čestice E manja ili veća od visine potencijalnog praga V_0.

U slučaju $E < V_0$ jednačina glasi

$$\frac{d^2\psi_{\mathrm{II}}}{dx^2} - \varkappa^2\psi_{\mathrm{II}} = 0, \tag{4.98}$$

gde je $\varkappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$, a njeno opšte rešenje je

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = Ce^{\varkappa x} + De^{-\varkappa x}. \tag{4.99}$$

Iz uslov konačnosti ψ_{II} kad $x \to \infty$ sledi da je $C = 0$, tj. $\psi_{\mathrm{II}} = De^{-\varkappa x}$.

U slučaju $E > V_0$ jednačina ima oblik

$$\frac{d^2\psi_{\mathrm{II}}}{dx^2} + k'^2\psi_{\mathrm{II}} = 0, \tag{4.100}$$

gde je $k'^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$, a njeno opšte rešenje je

$$\psi_{\mathrm{II}} = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}. \tag{4.101}$$

Za česticu koja dolazi iz $x = -\infty$ u oblasti II nema reflektovanog talasa, tj. mora biti $D = 0$. Prema tome odgovarajuće rešenje je $\psi_{\mathrm{II}} = Ce^{ik'x} = \psi_t$ i predstavlja tzv. *propušteni* (t) talas (slika 4.6(b)).

Za $E < V_0$ verovatnoća nalaženja čestice u oblasti II brzo opada ($\rho \sim e^{-2\varkappa x}$) tako da čestica praktično ne prolazi u tu oblast (osim u okolini $x = 0$). Ako je $E > V_0$, čestica koja iz oblasti I nailazi na potencijalni prag može da prođe u oblast II ili da se reflektuje nazad u oblast I. Verovatnoća da se desi refleksija odnosno prolazak (transmisija) može se odrediti pomoću gustina struja verovatnoće odgovarajućih talasa.

Gustine struje verovatnoće upadnog, reflektovanog i propuštenog talasa su

$$\mathbf{j}_i = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_i^*\frac{\mathrm{d}\psi_i}{\mathrm{d}x} - \psi_i\frac{\mathrm{d}\psi_i^*}{\mathrm{d}x}\right)\mathbf{e}_x = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}|A|^2,$$
$$\mathbf{j}_r = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_r^*\frac{d\psi_r}{dx} - \psi_r\frac{d\psi_r^*}{dx}\right)\mathbf{e}_x = -\frac{\hbar\mathbf{k}}{m}|B|^2,$$
$$\mathbf{j}_t = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_t^*\frac{d\psi_t}{dx} - \psi_t\frac{d\psi_t^*}{dx}\right)\mathbf{e}_x = \frac{\hbar\mathbf{k}'}{m}|C|^2.$$

Tada je koeficijent refleksije

$$R = \frac{|\mathbf{j}_r|}{|\mathbf{j}_i|} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left|\frac{B}{A}\right|^2, \tag{4.102}$$

a koeficijent transmisije

$$T = \frac{|\mathbf{j}_t|}{|\mathbf{j}_i|} = \frac{k'|C|^2}{k|A|^2} = \frac{k'}{k}\left|\frac{C}{A}\right|^2. \tag{4.103}$$

Uslovi neprekidnosti (za $E > V_0$)

$$\psi_{\mathrm{I}}(0) = \psi_{\mathrm{II}}(0), \quad \left(\frac{d\psi_{\mathrm{I}}}{dx}\right)_0 = \left(\frac{d\psi_{\mathrm{II}}}{dx}\right)_0 \tag{4.104}$$

daju

$$A + B = C, \quad A - B = \frac{k'}{k} C, \tag{4.105}$$

odakle su

$$B = \frac{k - k'}{k + k'} A, \quad C = \frac{2k}{k + k'} A. \tag{4.106}$$

Prema tome

$$R = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2, \quad T = \frac{4kk'}{(k + k')^2}, \tag{4.107}$$

odakle sledi

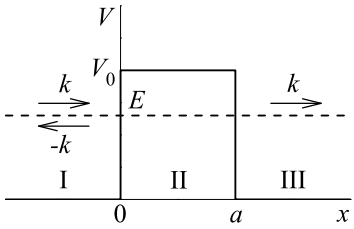
$$R + T = 1. \tag{4.108}$$

Kao što smo rekli, koeficijenti T i R predstavljaju verovatnoće da čestica koja dolazi iz $x = -\infty$ prođe potencijalni prag ili da se reflektuje nazad. Očigledno zbir ovih verovatnoća mora da bude jednak jedinici, što objašnjava poslednji rezultat.

4.3.5 Potencijalna barijera. Tunel efekat

Posmatrajmo sada kretanje čestice koja na delu svog puta nailazi na potencijalnu barijeru konačne visine (razlike maksimalne i minimalne vrednosti potencijala). Razmotrićemo prvo slučaj pravougaone barijere širine a i visine V_0 koju ćemo predstaviti potencijalom

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \le x \le a, \\ 0, & x < 0 \vee x > a. \end{cases} \tag{4.109}$$



Slika 4.7. Pravougaona potencijalna barijera širine a i visine V_0 (pune linije) i energija čestice $E < V_0$ (isprekidana linija). Strelicama (znakom) je naznačen smer i intenzitet talasnih vektora (talasnih brojeva) koji odgovaraju upadnom, reflektovanom i propuštenom talasu.

Ako je $0 < E < V_0$, rešenja Šredingerove jednačine u oblastima I, II i III su

$$\psi_{\mathrm{I}} = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \tag{4.110}$$

$$\psi_{\mathrm{II}} = A_2 e^{\varkappa x} + B_2 e^{-\varkappa x}, \tag{4.111}$$

$$\psi_{\mathrm{III}} = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}, \tag{4.112}$$

gde su $k^2 = 2mE/\hbar^2$ i $\varkappa = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$. Ukoliko čestica dolazi iz $x = -\infty$, onda u oblasti III nema reflektovanog talasa, tako da je $B_3 = 0$, odnosno $\psi_{\mathrm{III}} = A_3 e^{ikx}$.

Uslovi neprekidnosti

$$\psi_{\mathrm{I}}(0) = \psi_{\mathrm{II}}(0), \quad \psi_{\mathrm{II}}(a) = \psi_{\mathrm{III}}(a), \tag{4.113}$$

$$\left(\frac{d\psi_{\mathrm{I}}}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_{\mathrm{II}}}{dx}\right)_{x=0}, \quad \left(\frac{d\psi_{\mathrm{II}}}{dx}\right)_{x=a} = \left(\frac{d\psi_{\mathrm{III}}}{dx}\right)_{x=a} \tag{4.114}$$

u ovom slučaju daju

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \quad A_2 e^{\varkappa a} + B_2 e^{-\varkappa a} = A_3 e^{ika}, \tag{4.115}$$

$$ik(A_1 - B_1) = \varkappa(A_2 - B_2), \quad \varkappa(A_2 e^{\varkappa a} - B_2 e^{-\varkappa a}) = ikA_3 e^{ika}. \tag{4.116}$$

Pošto se koeficijenti refleksije i transmisije izražavaju preko količnika B_1/A_1 i A_3/A_1, podelićemo gornje jednačine sa A_1 i napisati u obliku

$$\begin{aligned} \frac{B_1}{A_1} - \frac{A_2}{A_1} - \frac{B_2}{A_1} &= -1, & e^{\varkappa a}\frac{A_2}{A_1} + e^{-\varkappa a}\frac{B_2}{A_1} - e^{ika}\frac{A_3}{A_1} &= 0, \\ -\frac{B_1}{A_1} - \frac{\varkappa}{ik}\frac{A_2}{A_1} + \frac{\varkappa}{ik}\frac{B_2}{A_1} &= -1, & e^{\varkappa a}\frac{A_2}{A_1} - e^{-\varkappa a}\frac{B_2}{A_1} - \frac{ik}{\varkappa}e^{ika}\frac{A_3}{A_1} &= 0. \end{aligned} \tag{4.117}$$

Ovaj sistem od 4 jednačine sa 4 nepoznate (C_1/A_1, A_2/A_1, B_2/A_1, A_3/A_1) je nehomogen, što znači da ima rešenje i u slučaju kada je determinanta sistema različita od nule. Drugim rečima, rešenja sistema postoje za svako $E < V_0$ i mogu se dobiti u analitičkom obliku.

Koeficijenti refleksije i transmisije su u ovom primeru dati izrazima $R = |B_1/A_1|^2$ i $T = |A_3/A_1|^2$, gde ćemo iskoristiti sledeće izraze dobijene rešavanje sistema jednačina (4.117)

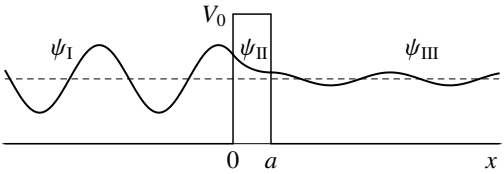
$$\frac{B_1}{A_1} = \frac{(\varkappa^2 + k^2)\,\mathrm{sh}\varkappa a}{(\varkappa^2 - k^2)\,\mathrm{sh}\varkappa a - 2ik\varkappa\,\mathrm{ch}\varkappa a}, \tag{4.118}$$

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{2ik\varkappa\, e^{-ika}}{(k^2 - \varkappa^2)\,\mathrm{sh}\varkappa a + 2ik\varkappa\,\mathrm{ch}\varkappa a}. \tag{4.119}$$

U ovom primeru ćemo posebno proučiti koeficijent transmisije. Zamenjujući poslednji izraz u izraz za T, nakon sređivanja dobijamo

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{k^2+\varkappa^2}{4k^2\varkappa^2}\,\mathrm{sh}^2\varkappa a}. \tag{4.120}$$

Pošto je koeficijent transmisije različit od nule sledi da, iako je $E < V_0$ (tj. klasična čestica ne može da pređe iz oblasti II u oblast III), postoji konačna verovatnoća da se čestica nađe sa druge strane barijere (oblast III). Ova pojava se naziva *tunel efekat*.



Slika 4.8. Talasna funkcija ψ čestice koja se kreće duž x-ose iz $x = -\infty$ i nailazi na pravougaonu potencijalnu barijeru. Delovi talasne funkcije ψ_{I}, ψ_{II}, ψ_{III} odgovaraju superpoziciji upadnog i reflektovanog talasa, opadajućem talasu kroz barijeru, odnosno propuštenom talasu.

U slučaju kada je $\varkappa a \gg 1$ biće $\operatorname{sh} \varkappa a \approx e^{\varkappa a}/2$, na osnovu čega je

$$T \sim e^{-2\varkappa a} = \exp\left\{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right\}. \tag{4.121}$$

Vidimo da koeficijent transmisije, tj. verovatnoća "tuneliranja" opada sa povećanjem mase, širine barijere i razlike $V_0 - E$.

Ukoliko barijera nije pravougaona već nekog proizvoljnog oblika, koeficijent transmisije možemo izračunati tako što interval $x \in (a, b)$ na kome je $V(x) > E$ izdelimo na uske segmenate širine Δx i barijeru aproksimiramo nizom pravougaonih barijera širine Δx (slika 4.9). Ako interval (a, b) podelimo na n semenata, širina segmenta je $\Delta x = (b-a)/n$, a koeficijent transmisije kroz i-ti segment barijere je pribižno

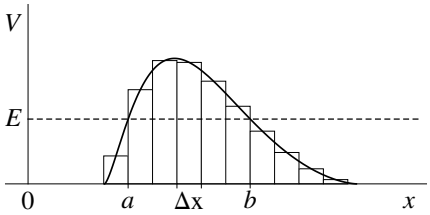
$$T_i \sim e^{-2\varkappa \Delta x} = \exp\left\{-\frac{2\Delta x}{\hbar}\sqrt{2m(V_i - E)}\right\}, \tag{4.122}$$

gde je V_i visina barijere na tom segmentu. Kao što smo već naveli, koeficijent transmisije predstavlja verovatnoću tuneliranja, pa će ukupan koeficijent transmisije T biti jednak je proizvodu koeficijenata T_i

$$T = T_1 T_2 \cdots T_n \equiv \prod_{i=1}^{n} T_i \sim \exp\left\{-\frac{2\Delta x}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}\sqrt{2m(V_i - E)}\right\}. \tag{4.123}$$

U graničnom slučaju kada $n \to \infty$ ($\Delta x \to 0$), suma u eksponentu prelazi u integral, tako da je ukupni koeficijent transmisije približno

$$T \sim \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m(V(x) - E)}\,\mathrm{d}x\right\}. \tag{4.124}$$



Slika 4.9. Aproksimacija potencijalne barijere proizvoljnog oblika nizom pravougaonih barijera male širine.

4.3.6 Linearni harmonijski oscilator

Hamiltonijan linearnog harmonijskog oscilatora ima oblik

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2, \tag{4.125}$$

gde je m masa čestice, a ω frekvencija oscilatora. Prema tome, odgovarajuća vremenski nezavisna Šredingerova jednačina glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi = E\psi. \tag{4.126}$$

Uvodeći novu nezavisno promenljivu $\xi = x\sqrt{m\omega/\hbar}$ jednačina uzima oblik

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + \varepsilon\right)\psi(\xi) = 0, \quad \text{gde je} \quad \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}. \tag{4.127}$$

Odredićemo prvo rešenje jednačine u asimptotskom slučaju $\xi \to \infty$. Tada je $|\varepsilon| \ll \xi^2$ i jednačina se svodi na

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2\right)\psi(\xi) = 0. \tag{4.128}$$

Rešenje ćemo potražiti u obliku $\psi \sim e^{b\xi^2}$. Zamenjujući ovaj izraz za ψ u poslednju jednačinu, sledi $b = \pm 1/2$, tj. rešenja su $e^{\pm\xi^2/2}$. Pošto rešenje $e^{\xi^2/2}$ divergira kad $\xi \to \pm\infty$, zadržavamo samo rešenje koje eksponencijalno opada, tj.

$$\psi(\xi) \sim e^{-\xi^2/2} \quad \text{kad} \quad \xi \to \pm\infty. \tag{4.129}$$

Opšte rešenje tražimo u obliku $\psi(\xi) = u(\xi)e^{-\xi^2/2}$. Zamenjujući ovu pretpostavku u jednačinu za $\psi(\xi)$, dobijamo jednačinu za $u(\xi)$

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} - 2\xi\frac{du}{d\xi} + (\varepsilon - 1)u = 0. \tag{4.130}$$

Rešenje ove jednačine tražimo u obliku reda $u(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k\xi^k$. Zamenjujući ovaj razvoj u poslednju jednačinu, sledi

$$\sum_{k=2}^{\infty} a_k k(k-1)\xi^{k-2} - 2\xi\sum_{k=1}^{\infty} a_k k\,\xi^{k-1} + (\varepsilon - 1)\sum_{k=0}^{\infty} a_k\xi^k = 0, \tag{4.131}$$

odnosno

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2}(k+2)(k+1)\xi^k - 2\xi\sum_{k=1}^{\infty} a_k k\,\xi^{k-1} + (\varepsilon - 1)\sum_{k=0}^{\infty} a_k\xi^k = 0. \tag{4.132}$$

Svođenjem na zajedničku sumu imamo

$$a_2 \cdot 2 \cdot 1 + (\varepsilon - 1)a_0 + \sum_{k=1}^{\infty}[a_{k+2}(k+2)(k+1) - 2a_k k + (\varepsilon - 1)a_k]\xi^k = 0. \quad (4.133)$$

Polinom na levoj strani biće jednak nuli samo ako su svi koeficijenti uz ξ^k jednaki nuli, što daje

$$a_2 = \frac{1-\varepsilon}{2\cdot 1}\, a_0, \quad a_{k+2} = \frac{2k+1-\varepsilon}{(k+2)(k+1)}\, a_k, \quad k = (0), 1, 2, 3, ... \quad (4.134)$$

Poslednja formula predstavlja rekurentnu relaciju koja povezuje svaki drugi koeficijent a_k. Prema tome, imaćemo dve klase rešenja – rešenja sa *parnim* i rešenja sa *neparnim* stepenima.

Da bi rešenja u obliku reda bila fizičku prihvatljiva, neophodno je da red sa koeficijentima određenim rekurentnom formulom konvergira. Iz kriterijuma

$$\lim_{k\to\infty} \frac{a_{k+2}}{a_k} = \lim_{k\to\infty} \frac{2}{k} = 0 \quad (4.135)$$

ne sledi automatski da red mora da divergira. Da bismo to proverili ispitaćemo ponašanje članova reda za velike vrednosti indeksa k. Kada $k \to \infty$, imamo $a_{k+2}/a_k \to 2/k$ i sukcesivno dalje

$$a_k \to \frac{2}{k}\, a_{k-2} \to \frac{2}{k}\frac{2}{k-2}\, a_{k-4} \to \cdots \to \frac{2}{k}\frac{2}{k-2}\cdots\frac{2}{3}\, a_0 \equiv \frac{a_0}{(k/2)!}. \quad (4.136)$$

Za velike vrednosti promenljive ξ dominantni članovi u sumi $\sum_{k=0}^{\infty} a_k\xi^k$ su oni sa velikim rednostima k. Prema tome, asimptotsko ponašanje rešenja možemo proceniti na osnovu ovih članova. Tako je npr. rešenje sa parnim koeficijentima

$$u(\xi) = \sum_{k/2=0}^{\infty} a_k\xi^k \approx a_0 \sum_{k/2=0}^{\infty} \frac{\xi^k}{(k/2)!} = a_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\xi^{2k}}{k!} = a_0\, e^{\xi^2}. \quad (4.137)$$

Tada je $\psi(\xi) = u(\xi)e^{-\xi^2/2} \sim e^{\xi^2/2}$, a ovaj izraz očigledno divergira kad $\xi \to \infty$.

Pošto su rešenja u obliku beskonačnog reda divergentna, jedina mogućnost da se dobije konačno rešenje je da njegov razvoj ima konačan broj članova. To je moguće ukoliko je za neko $k = n$: $a_k \neq 0$ i $a_{k+2} = 0$. Iz rekurentne formule sledi da su tada i svi viši koeficijenti jednaki nuli tako da suma postaje konačan polinom (n-tog reda). Zamenjujući navedene uslove u rekurentnu formulu, sledi

$$\frac{2n+1-\varepsilon}{(n+2)(n+1)}\, a_n = a_{n+2} = 0, \quad (4.138)$$

što daje $2n + 1 - \varepsilon = 0$, odnosno $\varepsilon = 2n + 1$. Konačno iz definicije parametra ε sledi

$$E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \ldots \quad (4.139)$$

Pošto konačna rešenja postoje samo za ove vrednosti energije, E_n predstavljaju moguće energijske nivoe linearnog harmonijskog oscilatora. Za svaku energiju E_n postoji samo jedna talasna funkcija ψ_n, te je spektar *diskretan* i *nedegenerisan*. Uočimo da je najniži energijski nivo (energija osnovnog stanja) $E_0 = \hbar\omega/2$, što znači da energija linearnog harmonijskog oscilatora nikada nije nula (v. "energija nulte tačke", odeljak 1.2.2). Ovo se može tumačiti relacijama neodređenosti.

Na osnovu predstavljene analize sledi da konačna rešenja $u(\xi)$ zadovoljavaju diferencijalnu jednačinu

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi} + 2nu(\xi) = 0, \tag{4.140}$$

koja poznata kao Ermit-Veberova diferencijalna jednačina i čija su rešenja Ermitovi polinomi $H_n(\xi)$. Prema tome, stacionarna stanja (svojstvene funkcije hamiltonijana) linearnog harmonijskog oscilatora se mogu napisati u obliku

$$\psi_n(x) = N_n\, e^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x. \tag{4.141}$$

Norma N_n se dobija iz uslova

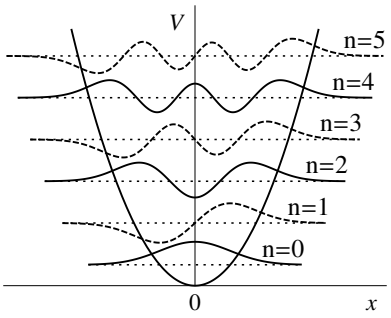
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2\, \mathrm{d}x = \frac{|N_n|^2}{\sqrt{m\omega/\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi)\, \mathrm{d}\xi = 1 \tag{4.142}$$

i iznosi

$$N_n = \sqrt{\frac{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}}{\sqrt{\pi}\, 2^n n!}}. \tag{4.143}$$

Može se pokazati da su funkcije $\psi_n(x)$ međusobno ortogonalne

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)\psi_{n'}(x)\, \mathrm{d}x = \delta_{nn'}. \tag{4.144}$$



Slika 4.10. Nekoliko najnižih energijskih nivoa linearnog harmonijskog oscilatora (tačkaste linije) i odgovarajuće talasne funkcije (parne – puna linija, neparne – isprekidana linija).

Navedimo takođe da funkcije $\psi_n(x)$ imaju određenu parnost koja se podudara sa parnošću kvantnog broja n. Ovu osobinu smo već uočili kod talasnih funkcija pravougaone potencijalne jame sa simetričnim zidovima. U opštem slučaju određena parnost talasnih funkcija kvantnog sistema je posledica invarijantnosti njegovog hamiltonijana pod transformacijom inverzije (ovde je to $x \to -x$), tj. činjenice da je $V(x)$ parna funkcija.

5 Čestica u centralnosimetričnom potencijalu. Teorija orbitalnog ugaonog momenta

U ovoj glavi ćemo razmotriti kvantnomehanički problem čestice u centralnosimetričnom potencijalu. Za razliku od primera iz prethodne glave gde je kretanje bilo ograničeno na jedan stepen slobode, ovde je reč o problemu u tri dimenzije koji je sa matematičkog stanovišta zahtevniji za rešavanje, ali može da se primeni za opis realnih fizičkih problema kao što je atom sa jednim elektronom. Da bismo odredili energijske nivoe i odgovarajuća (stacionarna) stanja ovakvih sistema, rešavaćemo vremenski nezavisnu Šredingerovu jednačinu koristeći metod razdvajanja promenljivih. Videćemo da se pri tome, kao deo ukupnog problema, pojavljuje svojstveni problem operatora kvadrata momenta impulsa čestice (tzv. orbitalnog ugaonog momenta). Iz tog razloga u okviru ove glave, kao posebno poglavlje, biće predstavljena i teorija orbitalnog ugaonog momenta.

5.1 Šredingerova jednačina za česticu u centralnosimetričnom potencijalu

5.1.1 Hamiltonijan čestice u polju centralnih sila

Centralnom silom nazivamo silu koja je usmerena ka jednoj tački u prostoru koju zovemo centrom sile. Ove sile u opštem slučaju imaju oblik $\mathbf{F} = f(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t)\,\mathbf{r}/r$, gde je $\mathbf{r}$ vektor položaja čestice u odnosu na centar sile. Od šireg interesa su, međutim, sile čiji intenzitet zavisi samo od intenziteta vektora položaja $r = |\mathbf{r}|$, tj. sile oblika $\mathbf{F} = f(r)\,\mathbf{r}/r$. Centralne sile poslednjeg oblika su uvek konzervativne. Za njih je karakteristično da potencijalna energija čestice na koju deluju ne zavisi od pravca vektora $\mathbf{r}$ već samo od njegovog intenziteta. Naime,

$$V(\mathbf{r}) = -\int \mathbf{F}\cdot \mathrm{d}\mathbf{r} = -\int f(r)\,\mathrm{d}r = V(r). \tag{5.1}$$

Za takav potencijal kažemo da je *centralnosimetričan* ili *sfernosimetričan*. Realistični primeri su Kulonov i gravitacioni potencijal, dok se u mnogim modelima u fizici često koristi potencijal izotropnog trodimenzionog harmonijskog oscilatora.

Ako sa μ označimo masu čestice,[1] hamiltonijan koji opisuje njeno kretanje u centralnosimetričnom potencijalu $V(r)$ glasi

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(r). \tag{5.2}$$

Zbog centralne (sferne) simetrije potencijala ovde je pogodno preći u sferne koordinate (r, ϑ, φ). Potencijal je tada funkcija samo jedne nezavisne promenljive – radijalne promenljive r (umesto tri promenljve x, y, z u pravouglom koordinatnom sistemu, povezane relacijom $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$). Kao što je poznato, veza između pravouglih i sfernih koordinata je data sledećim relacijama

$$\begin{aligned} x &= r\sin\vartheta\cos\varphi, \\ y &= r\sin\vartheta\sin\varphi, \\ z &= r\cos\vartheta. \end{aligned} \tag{5.3}$$

Da bismo hamiltonijan (5.2) predstavili u sfernim koordinatama, iskoristićemo izraz za Laplasov operator (laplasijan) u njima

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{5.4}$$

S druge strane, može se pokazati (koristeći npr. izraze (3.104)-(3.107) i (5.3)) da operator kvadrata orbitalnog momenta impulsa u sfernim koordinatama ima oblik

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{5.5}$$

Prema tome, hamiltonijan (5.2) možemo predstaviti u obliku

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2\mu r^2} + V(r). \tag{5.6}$$

Ako uvedemo operator

$$\hat{p}_r = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\,r, \tag{5.7}$$

za koji se pokazuje da je ermitski, nije teško pokazati da je prvi član u hamiltonijanu (5.6) ustvari $\hat{p}_r^2/(2\mu)$. Prema tome, hamiltonijan (5.6) možemo pisati u obliku

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2\mu r^2} + V(r) \tag{5.8}$$

koji je ekvivalentan obliku Hamiltonove funkcije za isti problem u klasičnoj mehanici. Odavde sledi da je $\hat{p}_r$ operator radijalne komponente impulsa $p_r = \mu\dot{r}$, pri čemu je $\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \hat{\mathbf{l}}^2/r^2$, kao što važi i za odgovarajuće klasične veličine.

[1] U ovoj glavi ćemo masu čestice obeležavati sa μ, umesto uobičajene oznake m koja je ovde rezervisana za kvantni broj projekcije orbitalnog ugaonog momenta. S druge strane potencijal $V(r)$ u realnosti opisuje interakciju dve čestice, a taj problem se obično rešava prelaskom u sistem centra mase čime se svodi na problem jedne čestice redukovane mase μ.

5.1.2 Šredingerova jednačina u sfernim koordinatama i razdvajanje radijalne od ugaonih promenljivih

Vremenski nezavisna Šredingerova jednačina (4.31) koja određuje stacionarna stanja i energijske nivoe čestice u centralnosimetričnom potencijalu $V(r)$ glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi(\mathbf{r}) + V(r)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \tag{5.9}$$

Koristeći izraz za hamiltonijan u sfernim koordinatama (5.6), jednačina uzima eksplicitniji oblik

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \left[\frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2\mu r^2} + V(r)\right]\psi(r,\vartheta,\varphi) = E\psi(r,\vartheta,\varphi), \tag{5.10}$$

koji nakon množenja sa $2\mu r^2$ i prebacivanja svih članova na jednu stranu, postaje

$$-\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \hat{\mathbf{l}}^2\psi(r,\vartheta,\varphi) + 2\mu r^2[V(r)-E]\psi(r,\vartheta,\varphi) = 0. \tag{5.11}$$

Da bismo izvršili razdvajanje radijalne od ugaonih promenljivih u jednačini, pretpostavićemo da se talasna funkcija može napisati u obliku proizvoda

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y(\vartheta,\varphi). \tag{5.12}$$

Zamenjujući ovako faktorisanu talasnu funkciju u jednačinu (5.11), dobijamo

$$-\hbar^2 Y(\vartheta,\varphi)\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + R(r)\hat{\mathbf{l}}^2 Y(\vartheta,\varphi) + 2\mu r^2[V(r)-E]R(r)Y(\vartheta,\varphi) = 0, \tag{5.13}$$

što nakon deljenja sa leve strane sa $R(r)Y(\vartheta,\varphi)$ i prebacivanja člana u kome se pojavljuje opertor $\hat{\mathbf{l}}^2$ na desnu stranu, daje

$$-\frac{\hbar^2}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + 2\mu r^2[V(r)-E] = -\frac{1}{Y(\vartheta,\varphi)}\hat{\mathbf{l}}^2 Y(\vartheta,\varphi). \tag{5.14}$$

U poslednjoj jednačini izraz na levoj strani zavisi samo od radijalne promenljive r, dok je izraz na desnoj strani neka funkcija uglova ϑ i φ. Jednakost ova dva izraza je moguća jedino ako su oba izraza jednaka proizvoljnoj konstanti. Ako ovu, tzv. separacionu konstantu obeležimo sa $-\hbar^2\lambda$, dobijamo sledeće jednačine

$$\hat{\mathbf{l}}^2 Y(\vartheta,\varphi) = \hbar^2\lambda Y(\vartheta,\varphi), \tag{5.15}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[\frac{\hbar^2\lambda}{2\mu r^2} + V(r)\right]R(r) = ER(r). \tag{5.16}$$

Prva, tzv. *ugaona jednačina*, predstavlja svojstveni problem operatora orbitalnog ugaonog momenta, dok se druga naziva *radijalna jednačina*.

5.2 Teorija orbitalnog ugaonog momenta

5.2.1 Komutacione relacije

Operator orbitalnog ugaonog momenta smo uveli u glavi 3 izrazom (3.104), a njegove komponente u pravouglim koordinatama su date izrazima (3.105)-(3.107). Koristeći ove izraze, komutacione relacije (3.99) i osobine komutatora, dobija se da među komponentama orbitalnog ugaonog momenta važe sledeće komutacione relacije

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar\hat{l}_z, \quad [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar\hat{l}_x, \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar\hat{l}_y. \tag{5.17}$$

Npr. prva od njih se pokazuje na sledeći način

$$\begin{aligned}[\hat{l}_x, \hat{l}_y] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = \underbrace{[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x]} - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] \\ &= \overbrace{\hat{y}\hat{z}[\hat{p}_z, \hat{p}_x] + \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{z}[\hat{y}, \hat{p}_x]\hat{p}_z + [\hat{y}, \hat{z}]\hat{p}_z\hat{p}_x} + \cdots \\ &= -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x + \cdots = i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hbar\hat{l}_z.\end{aligned} \tag{5.18}$$

Uvodeći oznake $\hat{l}_x \equiv \hat{l}_1$, $\hat{l}_y \equiv \hat{l}_2$, $\hat{l}_z \equiv \hat{l}_3$, ove komutacione relacije se mogu napisati u jedinstvenom obliku

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ijk}\hat{l}_k, \quad i,j = 1,2,3, \tag{5.19}$$

gde je ε_{ijk} simbol Levi-Ćivita (Levi-Civita) koji uzima vrednosti

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{za } ijk = 123 \text{ ili ciklične permutacije,} \\ -1, & \text{za } ijk = 321 \text{ ili ciklične permutacije,} \\ 0, & \text{u ostalim slučajevima (bar 2 indeksa ista).} \end{cases} \tag{5.20}$$

Na osnovu ovih komutacionih relacija zaključujemo da istovremeno i precizno merenje komponenti orbitalnog ugaonog momenta nije moguće.

Operator kvadrata orbitalnog ugaonog momenta izražen preko komponenti $\hat{l}_i$ glasi $\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$. Za razliku od komponenti koje međusobno ne komutiraju, ovaj operator komutira sa sve tri komponente, tj.

$$[\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_i] = 0. \quad i = x, y, z. \tag{5.21}$$

Ovo se pokazuje koristeći komutacione relacije (5.19) i osobine komutatora

$$[\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_i] = \left[\sum_j \hat{l}_j^2, \hat{l}_i\right] = -\sum_j [\hat{l}_i, \hat{l}_j^2] = -\sum_j (\hat{l}_j\,[\hat{l}_i, \hat{l}_j] + [\hat{l}_i, \hat{l}_j]\hat{l}_j) \tag{5.22}$$

$$\begin{aligned} &= -i\hbar \sum_j \left(\hat{l}_j \sum_k \varepsilon_{ijk}\hat{l}_k + \sum_k \varepsilon_{ijk}\hat{l}_k\hat{l}_j\right) = -i\hbar \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk}\hat{l}_j\hat{l}_k - i\hbar \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk}\hat{l}_k\hat{l}_j \\ &= -i\hbar \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk}\hat{l}_j\hat{l}_k + i\hbar \sum_{j,k} \varepsilon_{ikj}\hat{l}_k\hat{l}_j = -i\hbar \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk}\hat{l}_j\hat{l}_k + i\hbar \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk}\hat{l}_j\hat{l}_k = 0. \end{aligned}$$

Na osnovu navedenih komutacionih relacije zaključujemo da je moguće istovremeno i precizno izmeriti kvadrat orbitalnog ugaonog momenta i jednu od njegovih komponenti. Po konvenciji se uzima komponenta l_z. Ovo takođe znači da operatori $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$ imaju zajedničke svojstvene funkcije. U glavi 3 (odeljak 3.4.3) smo razmotrili svojstveni problem operatora $\hat{l}_z$ i pokazali da on ima čisto diskretan spektar, pri čemu su odgovarajuće svojstvene vrednosti $l_z = \hbar m$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ U nastavku ćemo razmotriti svojstveni problem operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$.

5.2.2 Svojstveni problem operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$. Razdvajanje promenljivih

Koristeći izraz (5.5) za operator kvadrata orbitalnog ugaonog momenta, svojstveni problem ovog operatora (5.15) se svodi na jednačinu

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\,\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial Y}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\,\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}+\lambda Y(\vartheta,\varphi)=0. \tag{5.23}$$

U pitanju je parcijalna diferencijalna jednačina drugog reda sa uglovima ϑ i φ kao nezavisno promenljivim. Rešenje ove jednačine ćemo potražiti u obliku proizvoda

$$Y(\vartheta,\varphi)=\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi), \tag{5.24}$$

očekujući da će pri tome doći do razdvajanja promenljivih ϑ i φ u jednačini. Zamenom izraza (5.24) u jednačinu (5.23) dobijamo

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\vartheta}\right)\Phi(\varphi)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\,\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2}\,\Theta(\vartheta)+\lambda\,\Theta(\vartheta)\,\Phi(\varphi)=0, \tag{5.25}$$

što nakon množenja sa leve strane izrazom $\sin^2\vartheta/(\Theta\Phi)$ i prebacivanja člana u kome se pojavljuje drugi izvod po uglu φ na desnu stranu, daje

$$\frac{\sin\vartheta}{\Theta(\vartheta)}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\vartheta}\right)+\sin^2\vartheta\,\lambda=-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\,\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2}. \tag{5.26}$$

Pošto izraz na levoj strani u poslednjoj jednačini zavisi samo od ugla ϑ, a izraz na desnoj strani samo od ugla φ, jednakost je moguća jedino ako su oba izraza jednaka proizvoljnoj konstanti koju ćemo obeležiti sa c. Prema tome, jednačina se razlaže na dve nezavisne jednačine u kojima figuriše ista separaciona konstanta c

$$\sin\vartheta\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\vartheta}\right)+(\sin^2\vartheta\,\lambda-c)\,\Theta(\vartheta)=0, \tag{5.27}$$

$$-\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2}=c\,\Phi(\varphi). \tag{5.28}$$

Ako poslednju jednačinu pomnožimo sa $\hbar^2$ i uočimo da je $\hat{l}_z^2 = -\hbar^2\partial^2/\partial\varphi^2$ (na osnovu izraza (3.119) za operator $\hat{l}_z$), jednačina se svodi na svojstveni problem operatora kvadrata z-projekcije momenta impulsa

$$\hat{l}_z^2\Phi(\varphi) = \hbar^2 c\,\Phi(\varphi). \tag{5.29}$$

Pošto su u opštem slučaju svojstvene funkcije nekog operatora i kvadrata tog operatora međusobno jednake, a odgovarajuće svojstvene vrednosti drugog se poklapaju sa kvadratima svojstvenih vrednosti prvog,[2] proizilazi da su funkcije $\Phi(\varphi)$ ustvari svojstvene funkcije $\Phi_m(\varphi)$ operatora $\hat{l}_z$, koje su date izrazom (3.126), a $\hbar^2 c$ su kvadrati odgovarajućih svojstvenih vrednosti tog operatora $\hbar^2 m^2$ (prema tome, $c = m^2$), gde je m kvantni broj z-komponente orbitalnog ugaonog momenta ($m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$).

Zamenjujući separacionu konstantu u jednačini (5.27) izrazom m^2, dobijamo jednačinu za funkcije $\Theta(\vartheta)$

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\vartheta}\right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\right)\Theta(\vartheta) = 0. \tag{5.30}$$

Uvodeći smenu $x = \cos\vartheta$, jednačina se transformiše u oblik

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1-x^2)\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}x}\right] + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta(x) = 0. \tag{5.31}$$

Odredićemo prvo rešenja ove jednačine za slučaj $m = 0$, a zatim ćemo polazeći od ovih rešenja odrediti i rešenja u slučaju kada je $m \neq 0$.

5.2.3 Rešenja jednačine za funkciju Θ u slučaju $m = 0$

Uzimajući u jednačini (5.31) da je $m = 0$, jednačina se svodi na

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1-x^2)\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}x}\right] + \lambda\Theta(x) = 0. \tag{5.32}$$

Rešenja ove jednačine ćemo potražiti u obliku reda

$$\Theta(x) = \sum_{r=0}^{\infty} a_r x^r. \tag{5.33}$$

Zamenjujući ovaj razvoj funkcije Θ u jednačinu, dobijamo

$$\sum_{r=2}^{\infty} a_r r(r-1)x^{r-2} - \sum_{r=1}^{\infty} a_r r(r+1)x^r + \lambda\sum_{r=0}^{\infty} a_r x^r = 0, \tag{5.34}$$

što se takođe može napisati u obliku

$$\sum_{r=0}^{\infty} a_{r+2}(r+2)(r+1)x^r - \sum_{r=1}^{\infty} a_r r(r+1)x^r + \lambda\sum_{r=0}^{\infty} a_r x^r = 0, \tag{5.35}$$

[2] Iz $\hat{A}\psi_a = a\psi_a$ neposredno sledi $\hat{A}^2\psi_a \equiv \hat{A}\hat{A}\psi_a = \hat{A}a\psi_a = a^2\psi_a$.

odnosno

$$2a_2 + \sum_{r=1}^{\infty}[a_{r+2}(r+2)(r+1) - a_r r(r+1) + \lambda a_r]x^r + \lambda a_0 = 0. \tag{5.36}$$

Pošto je polinom jednak nuli jedino ako su koeficijenti uz sve članove x^r jednaki nuli, iz poslednje jednakosti sledi

$$a_2 = -\frac{\lambda}{2}a_0, \quad a_{r+2} = \frac{r(r+1)-\lambda}{(r+2)(r+1)}a_r, \; r = (0), 1, 2, \ldots \tag{5.37}$$

Uočimo da ova rekurentna relacija povezuje koeficijente u svakom drugom članu reda, što znači da su koeficijenti sa parnim i neparnim indeksima r međusobno nezavisni. Posledica toga je da postoje dve klase rešenja u obliku reda – rešenja sa parnim i rešenja sa neparnim stepenima, odnosno funkcije $\Theta(x)$ mogu biti ili *parne* ili *neparne*.

Da bi razvoj funkcije $\Theta(x)$ u red (5.33) sa koeficijentima određenim rekurentnom relacijom (5.37) mogao da bude fizički prihvatljivo rešenje, tj. konačna funkcija, neophodno je da red bude konvergentan. Kako je, međutim, granična vrednost količnika dva uzastopna člana u razvoju funkcije $\Theta(x)$ određene parnosti

$$\lim_{r\to\infty}\frac{a_{r+2}}{a_r} = \lim_{r\to\infty}\frac{r(r+1)-\lambda}{(r+2)(r+1)} = 1, \tag{5.38}$$

tj. nije manja od 1, sledi da red (5.33) i sa parnim i sa neparnim vrednostima indeksa divergira. U tom slučaju jedina mogućnost da rešenje oblika (5.33) bude konačno je da koeficijenti a_r za sve vrednosti indeksa r koje su veće od neke fiksne vrednosti koju ćemo obeležiti sa l budu jednaki nuli. Razvoj (5.33) se tada svodi na sumu sa konačnim brojem članova (red se "prekida" posle l-tog člana), koja iz tog razloga ima konačnu vrednost za svako x. Iz rekurentne formule (5.37) sledi da će se ovo desiti ako je $a_{l+2} = 0$ i $a_r \neq 0$ za $r \leq l$. Naime, ukoliko je $a_{l+2} = 0$, onda je takođe $a_{l+4} = a_{l+6} = \cdots = 0$. Rekurentna formula (5.37) za $r = l$ uz zahtev $a_{l+2} = 0$ i $a_l \neq 0$ daje

$$\frac{l(l+1)-\lambda}{(l+2)(l+1)}a_l = a_{l+2} \equiv 0. \tag{5.39}$$

Izraz na levoj strani može biti jednak nuli jedino ako je $l(l+1) - \lambda = 0$, tj. ako je $\lambda = l(l+1)$. S obzirom da l (maximalni stepen u "prekinutom" redu) može biti bilo koji nenegativan ceo broj, time su određene moguće vrednosti konstante λ, tj. svojstvene vrednosti operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$ koje odgovaraju svojstvenim funkcijama (5.24) za $m = 0$

$$\hbar^2\lambda = \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{5.40}$$

Vidimo da su fizički prihvatljiva rešenja jednačine (5.32) ustvari rešenja diferencijalne jednačine

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1-x^2)\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}x}\right] + l(l+1)\,\Theta(x) = 0. \tag{5.41}$$

Iz teorije specijalnih funkcija je poznato da su rešenja ove jednačine tzv. *Ležandrovi (Legendre) polinomi* koji se mogu predstaviti u obliku $P_l(x) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l} (1 - x^2)^l$ (Rodrigezova formula). Prema tome, funkcije $\Theta(\vartheta)$ koje su rešenja jednačine (5.30) za $m = 0$ su

$$\Theta_{l0}(\vartheta) = P_l(x) = P_l(\cos\vartheta), \quad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{5.42}$$

5.2.4 Rešenja jednačine za funkciju Θ za proizvoljno m

Jednačinu (5.31) sa proizvoljnom vrednošću m ćemo prepisati u obliku

$$(1 - x^2)\frac{\mathrm{d}^2\Theta}{\mathrm{d}x^2} - 2x\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}x} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1 - x^2}\right]\Theta(x) = 0, \tag{5.43}$$

pri čemu treba pokazati da parametar l i ovde uzima nenegativne celobrojne vrednosti. Uočimo da ova jednačina ima singularitet za $x = \pm 1$. Radi eleminacije singulariteta uvodimo smenu $\Theta(x) = (1 - x^2)^s u(x)$. Zamenjujući ovu smenu u jednačinu, imamo

$$(1 - x^2)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2} - 2x(2s+1)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} + \left[l(l+1) - 2s(2s+1) + \frac{4s^2 - m^2}{1 - x^2}\right]u(x) = 0. \tag{5.44}$$

Singularitet se eleminiše ako je $4s^2 - m^2 = 0$, tj. $s = \pm|m|/2$. Izabraćemo rešenje $s = |m|/2$. Jednačina za u tada postaje

$$(1 - x^2)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2} - 2x(|m|+1)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} + [l(l+1) - |m|(|m|+1)]\,u(x) = 0. \tag{5.45}$$

Uočimo da se u jednačini (5.30) kvantni broj m javlja u obliku kvadrata m^2. U poslednjoj jednačini on se pojavljuje kroz apsolutnu vrednost $|m|$. U oba slučaja jednačina ne zavisi od znaka kvantnog broja m, te očekujemo da se rešenja $\Theta_m(x)$ za m i $-m$ suštinski ne razlikuju. Drugim rečima, ona se mogu razlikovati do na proizvoljni faktor

$$\Theta_{-|m|}(x) = \mathrm{const}\,\Theta_{|m|}(x). \tag{5.46}$$

Slučaj $m \geq 0$. U ovom slučaju je $|m| = m$, tako da jednačina (5.45) postaje

$$(1 - x^2)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2} - 2x(m+1)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} + [l(l+1) - m(m+1)]\,u(x) = 0. \tag{5.47}$$

Da bismo odredili $u(x)$ poćićemo od diferencijalne jednačine za Ležandrove polinome

$$(1 - x^2)\frac{\mathrm{d}^2P_l}{\mathrm{d}x^2} - 2x\frac{\mathrm{d}P_l}{\mathrm{d}x} + l(l+1)\,P_l = 0. \tag{5.48}$$

Nakon višestrukog diferenciranja (m puta) jednačine po x dobijamo

$$(1 - x^2)\frac{\mathrm{d}^{m+2}P_l}{\mathrm{d}x^{m+2}} - 2x(m+1)\frac{\mathrm{d}^{m+1}P_l}{\mathrm{d}x^{m+1}} + [l(l+1) - m(m+1)]\frac{\mathrm{d}^mP_l}{\mathrm{d}x^m} = 0. \tag{5.49}$$

Poredeći dobijenu jednačinu sa jednačinom (5.47) sledi da, ukoliko je u ovoj drugoj l nenegativan ceo broj, njena rešenja su $u(x) = d^m P_l/dx^m$. Pokazuje se da su ovo (kao i u specijalnom slučaju $m = 0$) jedina konačna rešenja jednačine (5.47). Prema tome, fizički prihvatljiva rešenja jednačine (5.31), odnosno (5.43), postoje samo za $\lambda = l(l+1)$, gde je $l = 0, 1, 2, \ldots$, koja u slučaju $m > 0$ imaju oblik

$$\Theta_{lm}(x) \sim (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{\mathrm{d}^m P_l}{\mathrm{d}x^m} \equiv P_l^m(x). \tag{5.50}$$

Funkcije $P_l^m(x)$ se nazivaju *pridruženi (asocirani) Ležandrovi polinomi*, a jednačina oblika (5.43) sa celobrojnim nenegativnim vrednostima od l predstavlja njihovu diferencijalnu jednačinu.

Da bismo izvršili normiranje ovih funkcija i odredili njihov oblik za $m < 0$, iskoristićemo osobinu ortogonalnosti pridruženih Ležandrovih polinoma[3]

$$\int_{-1}^{1} P_l^m(x) P_{l'}^m(x)\,\mathrm{d}x = \frac{2}{2l+1}\,\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\,\delta_{ll'} \tag{5.51}$$

i relaciju među polinomima sa suprotnim znakom od m

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!}\,P_l^m(x). \tag{5.52}$$

Relacija (5.51) za $l = l'$ daje kvadrat norme ovih polinoma

$$\int_{-1}^{1} |P_l^m(x)|^2 \mathrm{d}x = \frac{2}{2l+1}\,\frac{(l+m)!}{(l-m)!}. \tag{5.53}$$

Pošto se uzima da su funkcije $\Theta_{lm}(\vartheta)$ normirane na jedinicu, tj.

$$\int_0^{\pi} |\Theta_{lm}(\vartheta)|^2 \sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta = \int_{-1}^{1} |\Theta_{lm}(x)|^2 \mathrm{d}x = 1, \tag{5.54}$$

iz (5.53) dobijamo koeficijent proporcionalnosti između $|\Theta_{lm}|$ i $|P_l^m|$

$$\frac{|\Theta_{lm}(x)|}{|P_l^m(x)|} = \sqrt{\frac{2l+1}{2}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}, \tag{5.55}$$

odakle je

$$\frac{\Theta_{lm}(x)}{P_l^m(x)} = a_m \sqrt{\frac{2l+1}{2}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}, \tag{5.56}$$

gde je a_m proizvoljni fazni faktor ($|a_m| = 1$). U literaturi se najčešće biraju vrednosti $a_m = 1$ i $a_m = (-1)^m$. Mi ćemo izabrati ovu drugu vrednost, dakle

$$\Theta_{lm}(x) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,P_l^m(x) \quad \text{za} \quad m \geq 0. \tag{5.57}$$

[3] Ortogonalnost pridruženih Ležandrovih polinoma po indeksu m nećemo razmatrati pošto će nam biti dovoljna ortogonalnost funkcija $\Phi_m(\varphi)$ po m.

Slučaj $m \leq 0$. Rešenja jednačine (5.43) za $m \leq 0$ treba na osnovu relacije (5.46) da budu proporcionalna rešenjima za $m \geq 0$ sa istom vrednošću $|m|$, pri čemu se za normirana rešenja konstanta prorcionalnosti svodi na fazni faktor jedinične norme. Konstantu ćemo izabrati tako da relacija (5.57) bude invarijantna pod transformacijom $m \to -m$. Ovaj zahtev, a zatim primena relacije (5.52), daje

$$\Theta_{l,-m}(x) = (-1)^{-m} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} P_l^{-m}(x) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(x), \qquad (5.58)$$

gde je i dalje $m \geq 0$, odnosno

$$\Theta_{lm}(x) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(x) \quad \text{za} \quad m \leq 0. \qquad (5.59)$$

Poredeći ovaj izraz sa izrazom (5.57) vidimo da se funkcije $\Theta_{lm}(x)$ za $m \leq 0$ i $m \geq 0$ sa istom vrednošću $|m|$ zaista razlikuju samo za faktor $(-1)^m$.

Konačno, izrazi (5.57) i (5.59) se mogu napisati u opštem obliku za proizvoljno m

$$\Theta_{lm}(x) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(x), \qquad (5.60)$$

odakle takođe sledi već pomenuta osobina

$$\Theta_{l,-m}(x) = (-1)^m \Theta_{lm}(x). \qquad (5.61)$$

Indeks l koji, pored kvantnog broja m, prebrojava funkcije $\Theta_{lm}(x)$, a takođe i različite svojstvene vrednosti operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$ (izraz (5.40)), naziva se *orbitalni kvantni broj* i uzima nenegativne celobrojne vrednosti ($l = 0, 1, 2, \ldots$).

U odeljku 3.4.3 smo pokazali da kvantni broj m koji prebrojava svojstvene funkcije operatora $\hat{l}_z$ može da ima bilo koju celobrojnu vrednost. Ovo, međutim, ne važi za funkcije $\Theta_{lm}(x)$. Pokazaćemo da su pridruženi Ležandrovi polinomi $P_l^{|m|}(x)$, a time i funkcije $\Theta_{lm}(x)$, jednaki nuli ako je $|m| > l$. U tom cilju iskoristićemo izraz

$$P_l^{|m|}(x) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{\mathrm{d}^{l+|m|}}{\mathrm{d}x^{l+|m|}} (1-x^2)^l \qquad (5.62)$$

koji se dobija iz izraza za pridružene Ležandrove polinome naveden u relaciji (5.50) i tzv. Rodrigezove formule za Ležandrove polinome. Pošto je $(l + |m|)$-ti izvod člana sa najvećim stepenom u razvoju $(1 - x^2)^l = 1 - lx^2 + \ldots + (-1)^l x^{2l}$ jednak nuli ako je $|m| > l$, to važi za sve članove ovog razvoja odnosno za ceo izraz $(1 - x^2)^l$. Prema tome, kvantni broj m koji prebrojava funkcije $\Theta_{lm}(x)$ sa datom vrednošću orbitalnog kvantnog broja l uzima vrednosti

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l. \qquad (5.63)$$

5.2.5 Sferni harmonici

Zamenom izraza (5.59) i (3.126) za funkcije Θ_{lm} odnosno Φ_m u relaciju (5.24), dobijamo

$$Y_l^m(\vartheta,\varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\, P_l^{|m|}(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi}, \tag{5.64}$$

pri čemu su $l = 0, 1, 2, \ldots$ i $m = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm l$. Funkcije $Y_l^m(\vartheta,\varphi)$ se nazivaju *sferni harmonici* i predstavljaju zajedničke svojstvene funkcije operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$. Prema tome, zajednički svojstveni problem ovih operatora možemo pisati u obliku

$$\hat{\mathbf{l}}^2 Y_l^m(\vartheta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\vartheta,\varphi), \tag{5.65}$$

$$\hat{l}_z Y_l^m(\vartheta,\varphi) = \hbar m Y_l^m(\vartheta,\varphi). \tag{5.66}$$

Iz relacije (5.61) i izraza za funkciju Φ_m sledi sledeća osobina sfernih harmonika

$$Y_l^{-m}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m\, Y_l^{m*}(\vartheta,\varphi). \tag{5.67}$$

Eksplicitne izraze za sferne harmonike možemo odrediti koristeći formulu

$$P_l^{|m|}(\cos\vartheta) = \frac{(-1)^l}{2^l\, l!} \sin^{|m|}\vartheta\, \frac{\mathrm{d}^{l+|m|}}{(\mathrm{d}\cos\vartheta)^{l+|m|}} \sin^{2l}\vartheta, \tag{5.68}$$

koja je dobijena vraćanjem smene $x = \cos\vartheta$ u izraz (5.62). Tako su npr.

$$P_0^0(\cos\vartheta) = 1, \quad P_1^0(\cos\vartheta) = -\frac{1}{2}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\cos\vartheta} \sin^2\vartheta = \cos\vartheta, \tag{5.69}$$

$$P_1^1(\cos\vartheta) = -\frac{1}{2}\,\sin\vartheta\,\frac{\mathrm{d}^2}{(\mathrm{d}\cos\vartheta)^2} \sin^2\vartheta = \sin\vartheta, \tag{5.70}$$

odakle dobijamo izraze za sferne harmonike sa $l = 0$ i 1

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\cos\vartheta, \quad Y_1^{\pm1} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi}. \tag{5.71}$$

5.2.6 Parnost sfernih harmonika

Operator parnosti $\hat{P}$ deluje na proizvoljnu talasnu funkciju $\psi(\mathbf{r})$ na sledeći način

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}). \tag{5.72}$$

Na osnovu toga je $\hat{P}^2\psi(\mathbf{r}) = \hat{P}\psi(-\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$, pa možemo reći da je jedina svojstvena vrednost kvadrata operatora parnosti $P^2 = 1$. Odavde zaključujemo da sam operator parnosti ima dve svojstvene vrednosti, $P = 1$ i $P = -1$. Svojstvene funkcije operatora parnosti koje odgovaraju ovim svojstvenim vrednostima su parne funkcije (za koje važi $\psi(-\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$) odnosno neparne funkcije (za koje je $\psi(-\mathbf{r}) = -\psi(\mathbf{r})$).

Pošto je transformacija $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$ ekvivalentna skupu transformacija $\{r \to r, \vartheta \to \pi - \vartheta, \varphi \to \pi + \varphi\}$, operator parnosti deluje na sferne harmonike na sledeći način

$$\hat{P}\, Y_l^m(\vartheta, \varphi) = Y_l^m(\pi - \vartheta, \pi + \varphi). \tag{5.73}$$

Koristeći relacije: $\sin(\pi - \vartheta) = \sin\vartheta$, $\cos(\pi - \vartheta) = -\cos\vartheta$, $e^{im(\pi+\varphi)} = (-1)^m e^{im\varphi}$ i rezultat

$$P_l^{|m|}(-\cos\vartheta) = \frac{(-1)^l}{2^l\, l!} \sin^{|m|}\vartheta\, (-1)^{l+|m|}\, \frac{\mathrm{d}^{l+|m|}}{(d\cos\vartheta)^{l+|m|}} \sin^{2l}\vartheta = (-1)^{l+|m|} P_l^{|m|}(\cos\vartheta), \tag{5.74}$$

dobijamo

$$Y_l^m(\pi - \vartheta, \pi + \varphi) = (-1)^{l+|m|}(-1)^m\, Y_l^m(\vartheta, \varphi) = (-1)^l\, Y_l^m(\vartheta, \varphi), \tag{5.75}$$

odnosno

$$\hat{P}\, Y_l^m(\vartheta, \varphi) = (-1)^l\, Y_l^m(\vartheta, \varphi). \tag{5.76}$$

Prema tome, parnost sfernih harmonika (tj. odgovarajuća svojstvena vrednost operatora parnosti) je $(-1)^l$. Sferni harmonici su dakle parne ili neparne funkcije, zavisno od parnosti orbitalnog kvantnog broja l.

5.3 Radijalni problem

5.3.1 Opšta teorija

Vratimo se sada na hamiltonijan za česticu u sferno-simetričnom potencijalu dat izrazima (5.6), odnosno (5.8). Pošto $\hat{\mathbf{l}}^2$ zavisi samo od uglova ϑ i φ, operatori $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$ komutiraju sa operatorom (5.7), a time i sa prvim (radijalnim) članom u Hamiltonijanu i sa celim Hamiltonijanom, tj.

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{l}}^2] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{l}_z] = 0, \quad [\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_z] = 0. \tag{5.77}$$

Odavde sledi da operatori $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$ imaju zajedničke svojstvene funkcije (oblika (5.12)), odnosno da je moguće istovremeno i tačno izmeriti energiju čestice, kvadrat njenog orbitalnog ugaonog momenta i z-projekciju tog momenta.

Moguće vrednosti poslednje dve veličine smo odredili u prethodnom poglavlju. Znajući da su svojstvene vrednosti operatora kvadrata orbitalnog ugaonog momenta $\hbar^2 l(l+1)$, $l = 0, 1, 2, \ldots$, odnosno da je separaciona konstanta koja se pojavljuje u radijalnoj jednačini (5.16) $\lambda = l(l+1)$, jednačinu sada možemo pisati u obliku

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2 \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r)\right] R(r) = E R(r). \tag{5.78}$$

Uočimo da se u radijalnoj jednačini ne javlja kvantni broj m tako da ni radijalna funkcija $R(r)$, kao ni energija E, ne zavise od tog kvantnog broja. Prema tome, E će biti najmanje $2l+1$ puta degenerisana ($2l+1$ vrednosti za m u $\psi = R\, Y_l^m$).

Radijalna jednačina uzima jednostavniji oblik koristeći smenu $u(r) = rR(r)$. Tada

$$\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} = \frac{1}{r^2}\left(r\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r} - u\right) \quad \text{i} \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right) = r\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}. \tag{5.79}$$

Zamenjujući ove izraze u radijalnu jednačinu dobijamo jednačinu za $u(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]u(r) = Eu(r). \tag{5.80}$$

Jednačina ima identičan oblik kao Šredingerova jednačina nekog jednodimenzionog problema, s tim što se ovde umesto pravog potencijala $V(r)$ pojavljuje efektivni potencijal

$$V_{\mathrm{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}, \tag{5.81}$$

koji pored $V(r)$ uključuje i tzv. centrifugalnu barijeru.

5.3.2 Rešavanje radijalne jednačine za Kulonov potencijal. Diskretni energijski spektar atoma sa jednim elektronom

Posmatrajmo kretanje elektrona u polju jezgra nalektrisanja Z. Njihova interakcija sa jezgrom na rastojanju r je opisana Kulonovim potencijalom

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}. \tag{5.82}$$

Ako je masa elektrona m_e, a masa jezgra m_j, relativno kretanje ovog sistema je ekvivalentno kretanju čestice efektivne mase $\mu = m_e m_j/(m_e + m_j)$ u sistemu centra mase. U ovom slučaju jednačina za $u(r)$ ima oblik

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \left[-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]u(r) = Eu(r). \tag{5.83}$$

Ovde ćemo razmotriti vezano kretanje elektrona koje za ovaj tip potencijala odgovara energijama $E < 0$.

Prebacujući sve članove na levu stranu i množeći sa $-2\mu/\hbar^2$, jednačina ima oblik

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} + E\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r) = 0. \tag{5.84}$$

Ovde je pogodno uvesti bezdimenzionu promenljivu $\rho = \sqrt{-8\mu E/\hbar^2}\, r$. Uz ovu smenu jednačina, nakon delenja sa $-8\mu E/\hbar^2$, postaje

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2} + \left(-\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\Lambda}{\rho} - \frac{1}{4}\right)u(\rho) = 0, \tag{5.85}$$

gde je

$$\Lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\sqrt{-\frac{\mu}{2E}}. \tag{5.86}$$

Odredićemo prvo asimptotsko rešenje kada $\rho \to \infty$. Jednačina se u tom slučaju svodi na oblik

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2} - \frac{1}{4}u(\rho) = 0, \quad \text{čije je rešenje} \quad u(\rho) = Ae^{-\rho/2} + Be^{\rho/2}. \tag{5.87}$$

Da bi talasna funkcija u limitu $\rho \to \infty$ ostala konačna mora biti $B = 0$, tj. asimptotsko rešenje je $u(\rho) \sim e^{-\rho/2}$.

U sledećem koraku posmatramo ponašanje funkcije $u(\rho)$ u okolini koordinatnog početka, tj. kad $\rho \to 0$. Jednačina se u ovom slučaju svodi na oblik

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}u(\rho) = 0, \quad \text{čije je rešenje} \quad u(\rho) = C\rho^{l+1} + D\rho^{-l}. \tag{5.88}$$

Naime, ako potražimo rešenje u obliku $u = \rho^s$, zamenom u gornju jednačinu sledi $s(s-1)\rho^{s-2} - l(l+1)\rho^{s-2} = 0$, odnosno $s(s-1) = l(l+1)$, što daje $s = l+1, -l$. Pošto rešenje ρ^{-l} divergira kad $\rho \to 0$, uzimamo $D = 0$ tako da je rešenje u okolini koordinatnog početka $u(\rho) \sim \rho^{l+1}$.

Uzimajući u obzir ponašanje funkcije $u(\rho)$ pri $\rho \to 0$ i $\rho \to \infty$, opšte rešenje ćemo potražiti u obliku

$$u(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\rho/2}v(\rho). \tag{5.89}$$

Prvi i drugi izvod od u po ρ tada glase

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho} = \left[(l+1-\rho/2)v + \rho\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho}\right]\rho^l e^{-\rho/2}, \tag{5.90}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2} = \left\{\left[\frac{l(l+1)}{\rho} - l - 1 + \frac{\rho}{4}\right]v + (2l+2-\rho)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + \rho\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2}\right\}\rho^l e^{-\rho/2}. \tag{5.91}$$

Zamenjujući ove izraze u jednačinu za u dobija se

$$\begin{aligned}\left\{\rho\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2} + (2l+2-\rho)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + \left[\frac{l(l+1)}{\rho} - l - 1 + \frac{\rho}{4}\right]v \right.\\ \left. + \left[-\frac{l(l+1)}{\rho} + \Lambda - \frac{\rho}{4}\right]v\right\}\rho^l e^{-\rho/2} = 0,\end{aligned} \tag{5.92}$$

odnosno

$$\rho\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2} + (2l+2-\rho)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + (\Lambda - l - 1)v = 0. \tag{5.93}$$

Rešenje poslednje jednačine tražimo u obliku reda $v(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k$. Koristeći ovaj razvoj i izraze

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} k\, c_k \rho^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+1) c_{k+1} \rho^k, \quad \frac{\mathrm{d}^2 v}{\mathrm{d}\rho^2} = \sum_{k=0}^{\infty} k(k+1) c_{k+1} \rho^{k-1} \tag{5.94}$$

jednačina za v postaje

$$\sum_{k=0}^{\infty} k(k+1) c_{k+1} \rho^k + (2l+2) \sum_{k=0}^{\infty} (k+1) c_{k+1} \rho^k - \sum_{k=0}^{\infty} k\, c_k \rho^k + (\Lambda - l - 1) \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k = 0, \tag{5.95}$$

odnosno

$$\sum_{k=0}^{\infty} [(k + 2l + 2)(k + 1) c_{k+1} + (\Lambda - k - l - 1) c_k] \rho^k = 0, \tag{5.96}$$

Da bi izraz na levoj strani bio nula, svi koeficijenti uz članove ρ^k moraju biti nule, što daje

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} = \frac{k + l + 1 - \Lambda}{(k + 2l + 2)(k + 1)}. \tag{5.97}$$

Za veliko k imamo $c_{k+1}/c_k \to 1/k$, odnosno $c_{k+1} \approx 1/k!$. Na osnovu toga je $v(\rho) \approx \sum_{k=0}^{\infty} \rho^{k+1}/k! = \rho\, e^{\rho}$, tj. funkcija $u(\rho)$ odnosno $R(r)$ rastu kao $e^{\rho/2}$, dakle divergiraju kad $\rho \to \infty$.

Prema tome, jedini način da rešenje bude konačno je da razvoj $v(\rho) = \sum_k c_k \rho^k$ ima konačan broj članova. Iz rekurentne formule (5.97) sledi da će to biti slučaj ukoliko za dato l pri nekoj vrednosti od k, koju ćemo obeležiti sa n_r, imamo $c_{n_r} \neq 0$ i $c_{n_r+1} = 0$. Tada će svi koeficijenti c_k sa $k > n_r$ takođe biti jednaki nuli, tj. red se prekida posle vrednosti $k = n_r$. Rekurentna formula (5.97) za $k = n_r$, uz zahtev $c_{n_r} \neq 0$ i $c_{n_r+1} = 0$, daje

$$\frac{n_r + l + 1 - \Lambda}{(n_r + 2l + 2)(n_r + 1)} = \frac{c_{n_r+1}}{c_{n_r}} = 0. \tag{5.98}$$

Izraz na levoj strani može biti jednak nuli jedino ako je $\Lambda = n_r + l + 1$. Pošto je $\Lambda = \Lambda(E)$, proizilazi da su i energijski nivoi određeni vrednostima $\Lambda = n$, gde je

$$n = n_r + l + 1 \tag{5.99}$$

tzv. *glavni kvantni broj*. Iz činjenice da su n_r (tzv. radijalni kvantni broj) i n nenegativni celi brojevi sledi da je n prirodan broj ($n = 1, 2, 3, \ldots$). S druge strane, očigledno je $n \geq l + 1$, odakle proizilazi za dato n orbitalni kvantni broj može da ima vrednosti

$$l = 0, 1, \ldots, n - 1. \tag{5.100}$$

Konačno, koristeći izraz (5.86), relacija $\Lambda = n$ daje formulu za energijske nivoe

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^2 2n^2} \tag{5.101}$$

koji se poklapa sa Borovom formulom. Uočimo da energijski nivoi zavise samo od glavnog kvantnog broja, tj. u principu su degenerisani. Da bismo odredili stepen degeneracije, uočimo da za svako l postoji $2l + 1$ različitih vredosti od m. Prema tome, za dato n postoji n^2 različitih parova (l, m)

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2\sum_{l=0}^{n-1} l + \sum_{l=0}^{n-1} 1 = 2(n-1)n/2 + n = n^2 - n + n = n^2. \tag{5.102}$$

Ovo znači da energijskom nivou E_n odgovara n^2 različitih svojstvenih stanja ψ_{nlm}, tj. ovi nivoi su n^2 puta degenerisani.

5.3.3 Svojstvene funkcije vezanih stanja atoma sa jednim elektronom

Uzimajući $\Lambda = n$, diferencijalna jednačina za $v(\rho)$ postaje

$$\rho\frac{\mathrm{d}^2 v}{\mathrm{d}\rho^2} + (2l + 2 - \rho)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + (n - l - 1)v = 0. \tag{5.103}$$

Takođe, pošto su energije određene formulom (5.101), promenljivu ρ možemo pisati u obliku

$$\rho = \frac{2Z}{an}\, r, \tag{5.104}$$

gde je $a = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(\mu\, e^2)$ Borov radijus pri redukovanoj masi μ.

Iz teorije specijalnih funkcija je poznato da *Lagerovi polinomi*, koji se mogu predstaviti u obliku $L_m(x) = e^x \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}(x^m e^{-x})$, zadovoljavaju Lagerovu difrencijalnu jednačinu

$$x\frac{\mathrm{d}^2 L_m}{\mathrm{d}x^2} + (1 - x)\frac{\mathrm{d}L_m}{\mathrm{d}x} + mL_m = 0. \tag{5.105}$$

Ako se jednačina diferencira k puta dobija se

$$x\frac{\mathrm{d}^{k+2} L_m}{\mathrm{d}x^{k+2}} + (k + 1 - x)\frac{\mathrm{d}^{k+1} L_m}{\mathrm{d}x^{k+1}} + (m - k)\frac{\mathrm{d}^k L_m}{\mathrm{d}x^k} = 0. \tag{5.106}$$

Ovo je ustvari diferencijalna jednačina za *pridružene (asocirane) Lagerove polinome* $L_m^{(k)}(x) = d^k L_m/dx^k$ koja glasi

$$x\frac{\mathrm{d}^2 L_m^{(k)}}{\mathrm{d}x^2} + (k + 1 - x)\frac{\mathrm{d}L_m^{(k)}}{\mathrm{d}x} + (m - k)L_m^{(k)} = 0. \tag{5.107}$$

Uočimo da se jednačina (5.103) svodi na diferencijalnu jednačinu za pridružene Lagerove polinome ako izaberemo $k = 2l + 1$ i $m = n + l$. Prema tome, njena rešenja su

$$v_{nl}(\rho) = L_{n+l}^{(2l+1)}(\rho) \equiv \frac{\mathrm{d}^{2l+1}}{\mathrm{d}x^{2l+1}} L_{n+l}(\rho) \equiv \frac{\mathrm{d}^{2l+1}}{\mathrm{d}x^{2l+1}} [e^\rho \frac{\mathrm{d}^{n+l}}{\mathrm{d}x^{n+l}} (\rho^{n+l} e^{-\rho})]. \tag{5.108}$$

Navešćemo neke osobine Lagerovih i pridruženih Lagerovih polinoma. Važe sledeće rekurentne formule

$$\frac{\mathrm{d}L_n}{\mathrm{d}x} = n\left(\frac{\mathrm{d}L_{n-1}}{\mathrm{d}x} - L_{n-1}\right), \quad L_{n+1} = (2n-1-x)L_n - n^2 L_{n-1}. \tag{5.109}$$

Funkcija izvodnica je

$$\frac{1}{1-s}\, e^{-\frac{xs}{1-s}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} L_n(x). \tag{5.110}$$

Pridruženi Lagerovi polinomi se mogu predstaviti u obliku reda

$$L_n^{(s)}(x) = \sum_{k=0}^{n-s} (-1)^{k+s} \frac{(n!)^2 x^k}{k!(k+s)!(n-k-s)!}. \tag{5.111}$$

Kvadrat norme ovih polinoma (uz odgovarajuće težinske funkcije) iznosi

$$\int_0^\infty dx\, x^{s+1} e^{-x} [L_n^{(s)}(x)]^2 = \frac{(2n-s+1)(n!)^3}{(n-s)!}. \tag{5.112}$$

Zamenjujući rezultat (5.108) u smenu (5.89), radijalne funkcije $R(r) = u(r)/r$ konačno imaju oblik

$$R_{nl}(r) = N_{nl}\, \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{(2l+1)}(\rho). \tag{5.113}$$

Norma N_{nl} se dobija iz uslova $\int_0^\infty dr\, r^2 R_{nl}^2(r) = 1$ i relacije (5.112)

$$N_{nl} = -\sqrt{\left(\frac{2Z}{an}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}. \tag{5.114}$$

Faza (znak "$-$") je proizvoljna ali je izabrana tako da najviši stepen polinoma bude pozitivan.

U literaturi se često umesto pridruženih Lagerovih polinoma koriste uopšteni (generalisani) Lagerovi polinomi $L_\nu^s(x)$ koji zadovoljavaju diferencijalnu jednačinu

$$x\frac{\mathrm{d}^2 L_\nu^s}{\mathrm{d}x^2} + (s+1-x)\frac{\mathrm{d}L_\nu^s}{\mathrm{d}x} + \nu L_\nu^s = 0. \tag{5.115}$$

Ako su ovi polinomi normirani na sledeći način

$$\int_0^\infty dx\, x^s e^{-x} [L_\nu^s(x)]^2 = \frac{(\nu+s)!}{\nu!}, \tag{5.116}$$

onda je njihova veza sa pridruženim Lagerovim polinomima

$$L_\nu^{(s)}(x) = (-1)^s s!\,(\nu-s)! \binom{\nu}{s} L_{\nu-s}^s(x). \tag{5.117}$$

Uzimajući da je $s = 2l + 1$ i $\nu = n + l$ odatle sledi

$$L_{n+l}^{(2l+1)}(\rho) = -(n+l)!\, L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho). \tag{5.118}$$

Prema tome, radijalne funkcije se mogu napisati u obliku

$$R_{nl}(r) = N'_{nl}\, \rho^l e^{-\rho/2} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho), \tag{5.119}$$

pri čemu je u ovom slučaju norma

$$N'_{nl} = \sqrt{\left(\frac{2Z}{an}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}}. \tag{5.120}$$

Konačno, svojstvene funkcije koje odgovaraju energijskim nivoima E_n su

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi). \tag{5.121}$$

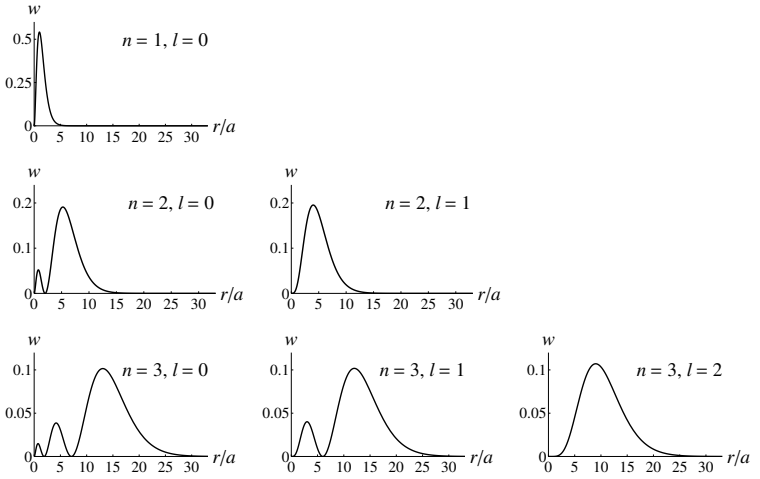
Verovatnoća da se elektron nađe u elementu zapremine $\mathrm{d}V$ oko tačke određene vektorom položaja $\mathbf{r}$ tada iznosi

$$|\psi_{nlm}(\mathbf{r})|\, \mathrm{d}V = |R_{nl}(r)|^2\, |Y_l^m(\vartheta, \varphi)|^2 r^2 \sin\vartheta\, \mathrm{d}r\, \mathrm{d}\vartheta\, \mathrm{d}\varphi, \tag{5.122}$$

što možemo pisati u obliku

$$|\psi_{nlm}(\mathbf{r})|\, \mathrm{d}V = w_{nl}(r)\, |Y_l^m(\vartheta, \varphi)|^2 \sin\vartheta\, \mathrm{d}r\, \mathrm{d}\vartheta\, \mathrm{d}\varphi, \tag{5.123}$$

gde je $w_{nl} = r^2[R_{nl}(r)]^2$ tzv. radijalna gustina verovatnoće nalaženja elektrona.



Slika 5.1. Elektronske radijalne gustine $w_{nl} = r^2[R_{nl}(r)]^2$ za nekoliko najnižih energijskih nivoa atoma vodonika ($Z = 1$).

Navedimo na kraju jednu zanimljivu činjenicu koja daje kvantnomehanički smisao Borovim orbitama. Naime, radijus n-te Borove orbite predstavlja upravo rastojanje na kojem radijalna gustina verovatnoće za dato n i maksimalno l ($l = n - 1$) ima maksimum. Da bismo ovo pokazali uočimo da je $R_{n,n-1} \sim \rho^{n-1} e^{-\rho/2} L_{2n-1}^{(2n-1)}$. Pošto je $L_{2n-1}^{(2n-1)} = \text{const}$, sledi da je radijalna gustina verovatnoće $w = r^2 (R_{n,n-1})^2 \sim r^{2n} e^{-\rho}$. Da bismo odredili rastojanje r gde se javlja njen maksimum, izračunaćemo izvod

$$\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}r} = 2n\, r^{2n-1} e^{-\rho} - r^{2n} e^{-\rho} \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}r} = 2n\, r^{2n-1} e^{-\rho} - \left(\frac{2Z}{an}\right) r^{2n} e^{-\rho} \tag{5.124}$$

i izjednačiti ga sa nulom. Jednačina $\mathrm{d}w/\mathrm{d}r = 0$ se svodi na

$$2n - r\frac{2Z}{an} = 0, \tag{5.125}$$

tj. $r = an^2/Z \equiv r_n$.

Bibliografija

I. Osnovna literatura

1. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Quantum Mechanics, Vol. 1, Hermann and John Wiley & Sons, Paris, 1977
2. А. С. Давыдов, Квантовая Механика, Наука, Москва, 1973
3. F. Herbut, Kvantna mehanika za istraživače, I. deo, Prirodno matematički fakultet Univerziteta u Beogradu, 1983
4. A. Messiah, Quantum Mechanics, Vol. I, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1966
5. L. I. Schiff, Quantum Mechanics, McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1949 (postoji izdanje na srpskom jeziku)

II. Dodatna literatura

A. Kvantna mehanika

1. R. H. Dicke, J. P. Wittke, Introduction to Quantum Mechanics, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, Massachusets, 1960
2. S. Gasiorowicz, Quantum Physics, John Wiley & Sons, NJ, 2003
3. D. J. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics, Prentice Hall, Inc., Upper Saddle River, NJ, 1995
4. D. Ivanović, Kvantna mehanika, Naučna knjiga, Beograd, 1974
5. L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics – Non-relativistic Theory, 3rd Ed., Pergamon Press Ltd., Oxford, 1977 (postoji izdanje na srpskom jeziku)

B. Matematička fizika

1. M. Damnjanović, Hilbertovi prostori i grupe, Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu, 2000
2. S. Ignjatović, Matematička fizika 1, Prirodno-matematički fakultet, Banja Luka, 2008

3. S. R. Ignjatović, Matematička fizika 3, Univerzitet u Banjoj Luci, Prirodno-matematički fakultet, Banja Luka, 2015
4. I. Milošević, Vektorski prostori i elementi vektorske analize, Univerzitet u Beogradu, 1997
5. D. S. Mitrinović, Uvod u specijalne funkcije, Građevinska knjiga, 1975
6. Đ. Mušicki i B. Milić, Matematičke osnove teorijske fizike, Naučna knjiga, Beograd, 1975
7. M. Vujičić, Linear Algebra Thoroughly Explained, Springer, Berlin, 2008
8. T. Vuković i S. Dmitrović, Osnovi matematičke fizike, Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu, 2017

C. Klasična teorijska mehanika

1. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Теоретическая физика – том I, Механика, Наука, Москва, 1988
2. B. Milić, Kurs klasične teorijske fizike, I deo, Njutnova mehanika, Univerzitet u Nišu, 1983
3. Đ. Mušicki, Uvod u teorijsku fiziku, I deo, Teorijska mehanika, Izdavačko-informativni centar studenata, Beograd, 1985

D. Opšti kursevi fizike

1. С. Э. Фриш, А. В. Тиморева, Курс общей физики, том III, ФИЗМАТГИЗ, Москва, 1961
2. D. Ivanović, M. Vučić, Atomska i nuklearna fizika, Fizika III, Naučna knjiga, Beograd, 1987
3. И. В. Савельев, Курс общей физики, том 3, Наука, Москва, 1979

Indeks

adjungovana matrica, 34
algebarska struktura, 23

bazis (baza) prostora, 25
    bazis ravnih talasa, 53
    neprekidni svojstveni bazis, 38
    ortonormirani bazis, 29
    svojstveni bazis, 37, 73
    svojstveni bazis hamiltonijana, 95
Borov radijus, 7
    pri redukovanoj masi, 130
Borove orbite, 7, 133
Borovi postulati, 6
brzina talasa
    fazna, 44
    grupna, 46, 48

centralnosimetrični (sfernosimetrični) potencijal, 115

de Broljev talas, 12, 44, 49
de Broljeva hipoteza, 11
    de Broljeva teorija, 88
dimenzija prostora, 25
Dirakova delta funkcija, 39, 40

efektivni potencijal, 127
energija osnovnog stanja
    asimetrične pravougaone potencijalne jame, 102
    linearnog harmonijskog oscilatora, 113
energijski nivoi, 94
    asimetrične pravougaone potencijalne jame, 102
    atoma sa jednim elektronom, 130
    beskonačno duboke pravougaone potencijalne jame, 104
    linearnog harmonijskog oscilatora, 113
Ermitovi polinomi, 113

fazni faktor
    talasne funkcije, 50
    vektora, 35
fotoelektrični efekat, 3
foton, 2, 3, 14, 15, 19
Furijeov razvoj, 41
Furijeova transformacija, 41
    inverzna, 41
    talasne funkcije, 53
Furijeovi koeficijenti, 30
    fizička interpretacija, 54, 76, 80
    razvoja u diskretnom bazisu, 74, 75
    razvoja u neprekidnom bazisu, 38, 78

granični uslovi, 51, 68, 99, 104
    asimptotski uslovi, 100, 103, 112
    uslovi neprekidnosti, 100, 103, 107, 109
grupa, 23
    Abelova, 23
gustina struje verovatnoće, 91, 107
gustina verovatnoće, 50, 55, 56
    radijalna, 132
    u nestacionarnom stanju, 96
    u stacionarnom stanju, 94

Hamilton-Jakobijeva jednačina, 90
hamiltonijan, 87, 90
    čestice u centralnosimetričnom potencijalu, 116
    čestice u potencijalu, 67
    linearnog harmonijskog oscilatora, 111
    slobodne čestice (jednodimenzioni), 71
Hamiltonova funkcija, 90
    čestice u potencijalu, 60, 89
Hevisajdova funkcija, 41
Hilbertov prostor, 29, 30, 38
    funkcionalni, 30, 50, 73
    opremljeni, 38, 78

izomorfizam prostora, 27

Jangov eksperiment, 13
jednačina kontinuiteta, 92
jednačina za funkciju Θ, 120
    rešenje u obliku reda, 120

karakteristični polinom, 36
koeficijent refleksije, 107, 109
koeficijent transmisije, 107, 109, 110
kolaps talasne funkcije (kvantni skok), 70
kompatibilne fizičke veličine, 83
komplementarnost, 17
Komptonov efekat, 3
komutacione relacije
    među komponentama koordinate i impulsa, 66
    među komponentama orbitalnog momenta impulsa, 118
    među operatorima $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$, 126
komutator, 31
koordinate (komponente) vektora, 26
Kopenhagenška škola, 13, 20
Kronekerov simbol, 29
Kulonov potencijal, 127
kvadratna integrabilnost, 30, 49, 73
kvant
    dejstva, 7
    energije, 2
    zračenja, 6
kvantizacija, 65
kvantni ansambl, 21
    homogen, 21, 69, 76
    nehomogen, 21
kvantni broj, 7, 69
    dobri kvantni brojevi, 97
    glavni, 129
    orbitalni, 124, 129
    radijalni, 129
    z-komponente momenta impulsa, 72, 120, 124
kvantni sistem, 16
    jednodimenzioni, 97
kvantni uslov(i)
    Bor-Zomerfeldovi, 9
    Vilson-Zomerfeldovi, 9
    za oscilator, 7
kvantno merenje, 16, 20, 84, 85, 92
    istovremeno merenje više veličina, 82
    merni instrument (uređaj), 16, 20, 92
    ponovljeno, 70, 76, 85, 92

Lagerovi polinomi, 130
    pridruženi (asocirani), 130
    uopšteni (generalisani), 131
Laplasov operator u sfernim koordinatama, 116
Ležandrovi polinomi, 122
    pridruženi (asocirani), 123
linearna kombinacija vektora, 25
linearna zavisnost vektora, 25
linearni harmonijski oscilator, 111

matrična mehanika, 11
matrična reprezentacija
    operatora, 32
    vektora, 27

norma funkcije, 31

norma talasne funkcije, 50
    održanje norme, 90
norma vektora, 29

određena vrednost fizičke veličine, 68, 69, 76
operator, 31
    adjungovani, 33
    diferencijalni, 62
    ermitski, 34
    fizičke veličine, 61
    impulsa, 62
    inverzni, 33
    jedinični, 33
    koordinate, 62
    kvadrata orbitalnog momenta impulsa (u sfernim koordinatama), 116
    linearni, 31
    momenta impulsa, 66
    multiplikativni, 62
    parnosti, 125
    unitarni, 34
    z-komponente momenta impulsa, 72
opservabla, 38, 61, 73
    kompletan skup kompatibilnih opservabli, 85, 86
    kompletna, 85
ortogonalnost vektora, 29

parnost talasne funkcije, 105, 114
    parne i neparne funkcije, 105, 113, 121, 125
    parnost sfernih harmonika, 126
Plankova hipoteza, 2
Plankova konstanta, 2
    redukovana, 3
polje, 24
potencijalna barijera, 108
    pravougaona, 108
    proizvoljnog oblika, 110
potencijalni prag, 106
pravougaona potencijalna jama
    asimetrična, 98
    beskonačno duboka, 104
    sa simetričnim zidovima, 103
princip kauzalnosti, 87
princip korespondencije, 9, 65, 88
princip neodređenosti, 16
princip superpozicije, 19, 45, 87
projektor, 34
promena stanja
    kao rezultat merenja, 70, 92
    sa vremenom (evolucija), 87, 92
propušteni talas, 107, 108
prostor stanja kvantnog sistema, 30, 45, 73

radijalna jednačina, 117, 126
    rešenje za Kulonov potencijal u obliku reda, 129
    za Kulonov potencijal, 127
radijalne funkcije, 131, 132
rasplinjavanje talasnog paketa, 48
ravni talas, 44
    jednodimenzioni, 71
    normiran na delta funkciju, 81
    normiran u ograničenoj zapremini, 51
    periodični granični uslovi, 52
razdvajanje promenljivih, 93, 117, 119
redukcija talasnog paketa, 70, 92
reflektovani talas, 106, 108
relacija zatvorenosti, 74, 75, 79
relacije neodređenosti, 17, 48, 83
relativna frekvencija rezultata merenja, 54
rezultat merenja fizičke veličine, 69

separaciona konstanta, 93, 117, 119
sferne koordinate, 116
sferni harmonici, 125
simbol Levi-Ćivita, 118
skalar, 24
skalarni proizvod
    funkcija, 30

vektora, 28
spektar operatora, 35
diskretan, 35, 69
neprekidan, 35, 38, 69
spektar opservable
degenerisan, 75, 77, 85
diskretan, 73, 76
nedegenerisan, 73, 76, 78, 85
neprekidan, 78
srednja vrednost
energije (preko svojstvenih energija), 96
energije čestice, 60
fizičke veličine, 60
fizičke veličine (preko svojstvenih vrednosti opservable), 76, 77, 80
funkcije impulsa, 59
funkcije koordinate, 57
impulsa, 57
promena sa vremenom, 96
rezultata merenja, 54
vektora položaja (koordinate), 56
zbira funkcija koordinate i impulsa, 60
srednje kvadratno odstupanje, 55
fizičke veličine, 67
stacionarna orbita, 6
stacionarno stanje, 6, 94
standardna devijacija (neodređenost), 56
stanje (kvantno, kvantnog sistema), 19, 43, 50
čisto, 21, 43
koherentno, 84
mešano, 22
nevezano (stanje kontinuuma), 106
osnovno, 94, 103
pobuđeno, 94
svojstveno, 68–70, 85
vezano, 94, 98, 103
stara kvantna teorija, 5
stepen degeneracije, 35, 75
energijskih nivoa atoma sa jednim elektronom, 130
superpozicija stanja, 45
superpozicija ravnih talasa, 45, 46
superpozicija stacionarnih stanja, 95
svojstvene funkcije
hamiltonijana, 93
hamiltonijana atoma sa jednim elektronom, 132
hamiltonijana linearnog harmonijskog oscilatora, 113
impulsa, 81
koordinate, 81
operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$, 125
operatora fizičke veličine (opservable), 68
uslovi da svojstvene funkcije predstavljaju kvantna stanja, 68
z-komponente momenta impulsa, 72
zajedničke, 82, 86, 125
svojstvene vrednosti, 35
degenerisane, 35, 68, 69, 75
nedegenerisane, 35, 69
operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$, 121
operatora fizičke veličine (opservable), 68, 70, 76
svojstvene energije, 93
svojstveni problem, 35
operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$, 119
operatora fizičke veličine (opservable), 68
operatora komponente impulsa, 71
operatora koordinate, 81
operatora z-komponente momenta impulsa, 72

svojstveni vektori, 35
Šredingerova jednačina, 87
    linearnog harmonijskog oscilatora, 111
    opšte rešenje, 95
    rešenje u obliku reda, 111
    vremenski nezavisna, 94
    za česticu u centralnosimetričnom potencijalu, 117
    za česticu u potencijalu, 89
    za jednodimenzione sisteme, 97
    za slobodnu česticu, 88

talasna funkcija, 19, 43
    osobine talasne funkcije, 31
    slobodne čestice, 88
    statistička interpretacija, 49
talasna mehanika, 12, 43
talasni broj, 3, 46
talasni paket, 46, 88
talasni vektor, 3, 46, 106, 108
    diskretizovani, 52
talasno-čestični dualizam, 5, 13
teorija svetlosti
    čestična (korpuskularna), 2, 14
    Ajnštajnova, 3
    talasna, 2, 14
tunel efekat, 109

ugaona jednačina, 117
uopšteni vektor, 38
upadni talas, 106, 108
uslov kompletnosti, 74, 75, 79

vektor, 24
vektorski prostor, 24
    ermitski prostor, 29
    euklidski prostor, 29
    funkcionalni Hilbertov prostor, 30, 50, 73
    Hilbertov prostor, 29, 30, 38
    opremljeni Hilbertov prostor, 38, 78
    unitarni prostor, 29
verovatnoća
    dobijanja određene vrednosti impulsa, 57
    dobijanja određene vrednosti fizičke veličine, 76, 77, 80
    nalaženja u elementu prostora, 49, 81
    rezultata merenja, 54

zakon kretanja za srednje vrednosti (Erenfestove jednačine), 97

CIP - Каталогизација у публикацији
Народна и универзитетска библиотека
Републике Српске, Бања Лука

530.14(075.8)

СИМОНОВИЋ, Ненад
Kvantna mehanika. 1 / Nenad Simonović, Darko Kapor. - 1. izd. - Banja Luka : Univerzitet u Banjoj Luci, Prirodno-matematički fakultet, 2018 ([s.l. : s.n.]). - VIII, 141 str. : ilustr. ; 24 cm

Tiraž 100. - Napomene i bibliografske reference uz tekst. - Bibliografija: str. 135-136. - Registar.

ISBN 978-99955-21-64-6

1. Капор, Дарко [аутор]

COBISS.RS-ID 7274008