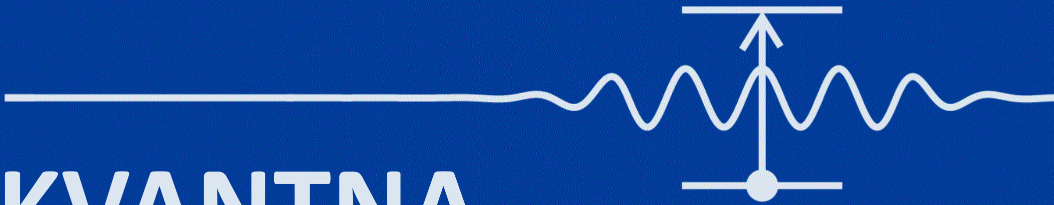
Nenad Simonović • Darko Kapor



# KVANTNA MEHANIKA 2

Univerzitet u Banjoj Luci
Prirodno-matematički fakultet

Nenad Simonović i Darko Kapor

# KVANTNA MEHANIKA 2

Univerzitet u Banjoj Luci
Prirodno-matematički fakultet
Banja Luka, 2024.

KVANTNA MEHANIKA 2 (prvo izdanje)

Autori:
Prof. dr Nenad Simonović
Prof. dr Darko Kapor

Recenzenti:
Dr Tasko Grozdanov
naučni savetnik Instituta za fiziku u Beogradu
Prof. dr Dejan Milošević
redovni profesor Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta u Sarajevu

Izdavač:
Univerzitet u Banjoj Luci / Prirodno-matematički fakultet

Ilustracija na naslovnoj strani:
Kvantni prelaz pri apsorpciji zračenja

ISBN 978-99976-49-46-1

Odlukom Senata Univerziteta u Banjoj Luci br. 02/04-3.2250-88/24 od 24. 10. 2024. godine, a na osnovu Predloga odluke Naučno-nastavnog veća Prirodno-matematičkog fakulteta br. 19-3.2469/24 od 09. 10. 2024. godine, data je saglasnost da se ova knjiga objavi kao univerzitetski udžbenik.

# Predgovor

Ova knjiga predstavlja udžbenik za drugi deo kursa kvantne mehanike, koji se u okviru dva nastavna predmeta, Kvantna mehanika 1 i Kvantna mehanika 2, drži na III godini osnovnih studija fizike na Prirodno-matematičkom fakultetu (PMF) u Banjoj Luci. Udžbenik je u potpunosti usaglašen sa planom i programom predmeta Kvantna mehanika 2 i sa sadržajem predmeta Kvantna mehanika 1, te sa kursevima matematičke, teorijske i opšte fizike koji se drže na prvoj i drugoj godini studija.

Kao i za prvi deo kursa, ovaj rukopis je zasnovan na predavanjima iz kvantne mehanike koja su na PMF-u u kontinuitetu od osnivanja Odsjeka za fiziku do danas držali autori, prvo prof. Kapor, a zatim prof. Simonović. Na predavanjima i pri pisanju kao uzor i literatura korišćeni su kvalitetni udžbenici sa univerziteta širom sveta, kao i nekoliko udžbenika domaćih autora. Napomenimo da je, saglasno praksi značajnog dela tih udžbenika, u ovom delu kursa korišćen tzv. opšti formalizam koji se oslanja na vektorsko predstavljanje kvantnih stanja i Dirakovu notaciju, a koji je izbegnut u prvom delu. Po našem mišljenju, time je postignuto postepeno ulaženje u dubinu materijala koji u celini čine oba kursa.

Ovom prilikom bismo želeli da zahvalimo koleginicama i kolegama sa Odsjeka za fiziku PMF-a u Banjoj Luci, kao i studentima više generacija koji su pratili predavanja iz oba dela kursa, na interesovanju i na korisnim diskusijama. Posebno zahvaljujemo recenzentima na ispravkama i sugestijama koje su značajno doprinele poboljšanju kvaliteta teksta. Unapred zahvaljujemo svim čitaocima koji nam budu ukazali na uočene greške u ovom izdanju u cilju njihovog ispravljanja u kasnijim izdanjima.

Septembar, 2024. Autori

# Sadržaj

# 6 Opšta formulacija kvantne mehanike

## 6.1 Predstavljanje kvantnih stanja pomoću vektora

### 6.1.1 Apstraktni Hilbertov prostor kao prostor stanja

U formulaciji kvantne mehanike koju nazivamo talasna mehanika i koja je predstavljena u prvom delu ovog kursa (Kvantna mehanika 1) stanje fizičkog (kvantnog) sistema opisano je talasnom funkcijom. Kvadrat modula talasne funkcije predstavlja gustinu verovatnoće nalaženja kvantnog sistema u posmatranoj tački konfiguracionog prostora, a ista funkcija određuje i verovatnoće pojavljivanja mogućih vrednosti fizičkih veličina pri njihovom merenju u tom stanju. Skup svih talasnih funkcija nekog kvantnog sistema, zahvaljujući principu superpozicije i definisanom skalarnom proizvodu, predstavlja jedan beskonačnodimenzioni ermitski vektorski prostor koji zovemo prostor stanja tog sistema. Uz to, probabilistička interpretacija talasne funkcije zahteva da njena norma bude konačna, čime se prostor stanja ograničava na skup kvadratno-integrabilnih funkcija. Dakle, u navedenoj formulaciji kvantne mehanike prostor stanja kvantnog sistema je funkcionalni Hilbertov (Lebegov) prostor $\mathcal{L}^2$ (v. odeljak 2.1.5 u prvoj knjizi)[1].

Ekvivalentnost različitih formulacija kvantne mehanike (npr. talasne i matrične mehanike) proizilazi iz činjenice da opšti principi kvantne mehanike jednoznačno određuju algebarsku strukturu prostora stanja (v. odeljke 2.1.1 i 2.1.5), ali ne i formu elemenata tog prostora. Kao posledica toga, kvantna stanja mogu biti predstavljena kako funkcijama iz $\mathcal{L}^2$ tako i elementima svakog drugog prostora koji je izomorfan sa $\mathcal{L}^2$, uključujući i apstraktni Hilbertov prostor $\mathcal{H}$ čiji elementi nemaju određenu formu. Zbog izomorfizma prostora $\mathcal{L}^2$ i $\mathcal{H}$, stanje koje je u prvom od njih opisano nekom talasnom funkcijom u drugom će biti predstavljeno odgovarajućim vektorom stanja, a linearna kombinacija (superpozicija) talasnih funkcija – linearnom kombinacijom vektora stanja sa istim koeficijentima kao u superpoziciji funkcija (v. odeljak 2.1.3). Vektori stanja, kao i talasne funkcije, s obzirom na to da su elementi odgovarajućih Hilbertovih prostora, imaju konačnu normu, čime je obezbeđena korektna interpretacija verovatnoće. Prelazeći na vektorsko predstavljanje stanja, dinamičkim varijablama, analogno kao u talasnoj mehanici, biće pridruženi odgovarajući ermitski operatori (opservable), u ovom slučaju takvi da deluju na vektore iz prostora stanja $\mathcal{H}$.

[1] Strogo govoreći, prostor stanja nešto je uži skup od $\mathcal{L}^2$, tačnije on je njegov potprostor čiji su elementi kvadratno-integrabilne funkcije, koje, pored toga, moraju biti i dovoljno regularne (v. odeljak 2.1.5).

Ideja o predstavljanju kvantnih stanja vektorima prirodno se nameće analizirajući razvoj talasne funkcije u nekom bazisu. Na primer, neka je $\psi(\mathbf{r})$ talasna funkcija koja opisuje stanje čestice, a skup funkcija $\{\varphi_1(\mathbf{r}), \varphi_2(\mathbf{r}), \ldots\}$ neki ortonormirani bazis u prostoru stanja te čestice. Tada je

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \, \varphi_i(\mathbf{r}), \tag{6.1}$$

gde su $c_i = (\varphi_i, \psi) = \int \varphi_i^*(\mathbf{r}) \, \psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}^3\mathbf{r}$ koeficijenti razvoja (tzv. Furijeovi koeficijenti, v. odeljak 2.1.4 u prvoj knjizi). Pri tome, pošto svaka talasna funkcija u cilju računanja verovatnoće treba da bude normirana na jedinicu, imamo $\sum_i |c_i|^2 = 1$. Kako je skup koeficijenata razvoja talasne funkcije u izabranom bazisu jednoznačan, kažemo da on reprezentuje (predstavlja) datu funkciju u tom bazisu (v. odeljak 2.1.3), a samim tim i odgovarajuće kvantno stanje koje ćemo ovde simbolički označiti sa $\psi$, dakle

$$\psi \longleftrightarrow \{c_1, c_2, \ldots\}. \tag{6.2}$$

Bilo kakav račun sa kvantnim stanjima u principu može se sprovesti zadajući ta stanja preko koeficijenata razvoja. Naravno, pri tome se podrazumeva da se sva stanja, ali i drugi činioci u računu (npr. operatori fizičkih veličina), reprezentuju u jednom istom bazisu (v. odeljak 2.2.2). Prelazeći na ovakav opis, matematički oblik funkcija koje čine bazis više nije od značaja. Njih tada možemo zameniti ortonormiranim skupom vektora $\{e_1, e_2, \ldots\}$ iz apstraktnog Hilbertovog prostora $\mathcal{H}$ koji je izomorfan prostoru stanja kvantnog sistema i u kome su vektori $e_i$ likovi funkcija $\varphi_i(\mathbf{r})$. U tom slučaju stanje zadato pridruživanjem (6.2) biće predstavljeno linearnom kombinacijom

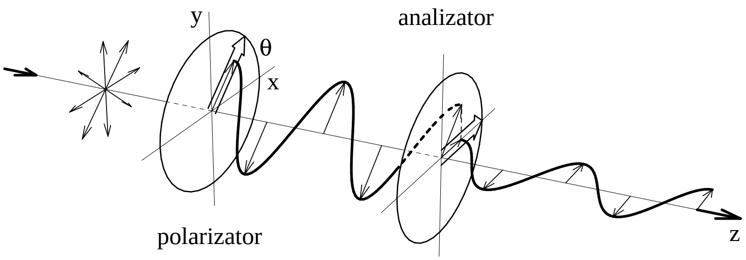
$$\psi = \sum_i c_i \, e_i, \tag{6.3}$$

koja je takođe vektor iz $\mathcal{H}$. Pri tome, ako je talasna funkcija (6.1) bila normirana na jedinicu ($\sum_i |c_i|^2 = 1$), uočimo da isto važi i za vektor stanja (6.3). Pošto se na opisani način svakom stanju kvantnog sistema pridružuje jedan vektor jedinične norme iz apstraktnog Hilbertovog prostora $\mathcal{H}$, taj prostor sada predstavlja prostor stanja tog sistema. Napomenimo da i ovde, kao i pri predstavljanju talasnim funkcijama, imamo nejednoznačnost do na fazni faktor, tj. vektori $\psi$ i $e^{i\alpha}\psi$ ($\forall\alpha \in \mathbb{R}$) predstavljaju isto kvantno stanje (v. odeljak 3.1.5).

Izgradnja kvantne teorije polazeći neposredno od koncepta vektora stanja, bez pozivanja na određenu reprezentaciju, pokazala se privlačnom idejom iz više razloga. Vektorsko predstavljanje, osim što pojednostavljuje kvantnomehanički formalizam, istovremeno ga i uopštava. Naime, kod kvantnih sistema postoje stepeni slobode, kao što je spin, koji se ne mogu na adekvatan način opisati pomoću talasne funkcije. Nasuprot tome, u prilazu preko vektora stanja takvih ograničenja nema. Iako vektori stanja u principu pripadaju Hilbertovom prostoru, spinska stanja se mogu adekvatno opisati vektorima iz prostora koji su konačne dimenzije. U poglavlju 11.3 videćemo da je prostor spinskih stanja pojedinačnog elektrona dvodimenzioni unitarni prostor. Slično važi i za prostor stanja polarizacije fotona. U slučaju linearne polarizacije taj prostor svodi se na samu ravan polarizacije jer su odgovarajuća stanja jednoznačno predstavljena jediničnim vektorima u toj ravni. U nastavku ćemo razmotriti tipičan eksperiment sa fotonima koji se odnosi na merenje njihove polarizacije i na tom jednostavnom primeru sagledati kako se opšti principi i koncepti kvantne mehanike (kao što su princip superpozicije i neodređenosti, te koncept merenja i promene stanja pri merenju) ispoljavaju pri vektorskom predstavljanju stanja.

### 6.1.2 Primer predstavljanja stanja pomoću vektora: Polarizacija fotona

Iz optike je poznato da se linearno polarizovana svetlost može dobiti iz nepolarizovane svetlosti propuštanjem kroz tzv. polarizator. Podsetimo se da kod linearno polarizovane svetlosti vektor električnog (odnosno magnetnog) polja, koji je zbog transverzalnog karaktera elektromagnetih talasa normalan na pravac prostiranja, ima određenu (fiksnu) orijentaciju u prostoru (tzv. pravac polarizacije). Nepolarizovana svetlost, s druge strane, predstavlja rezultat mešanja svetlosti iz velikog broja izvora koji emituju svetlost različitih pravaca polarizacije. Polarizator ima osobinu da propušta samo komponentu svetlosti određenog pravca polarizacije, karakterističnog za taj polarizator. Očigledno, obrtanjem polarizatora za neki ugao oko ose duž koje dolazi upadni nepolarizovani snop možemo menjati pravac polarizacije dobijene linearno polarizovane svetlosti.




**Slika 6.1.** Nepolarizovani snop svetlosti koji se prostire duž z-ose (levo) delimično prolazi kroz polarizator koji je postavljen tako da propušta komponentu svetlosti čiji pravac polarizacije zaklapa ugao $\theta$ (u xy-ravni) u odnosu na x-osu. Tako dobijen linearno polarizovani snop prolazi kroz analizator (drugi polarizator) koji je postavljen tako da propušta komponentu svetlosti polarizovanu u pravcu x-ose. Pravci i amplitude električnog polja u sve tri faze prostiranja snopa predstavljene su strelicama ortogonalnim na z-osu.

Pretpostavimo sada da snop linearno polarizovane svetlosti početnog intenziteta $I$ prolazi kroz drugi polarizator (tzv. analizator). Neka je pravac prostiranja svetlosti izabran za z-osu i neka je analizator postavljen tako da propušta komponentu svetlosti polarizovanu u pravcu x-ose (slika 6.1). Tada, ako je polarizacija upadnog snopa (iz polarizatora) u pravcu x-ose, propušteni snop će imati intenzitet $I' = I$, dok će u slučaju kada je polarizacija u pravcu y-ose snop biti potpuno apsorbovan ($I' = 0$). Ako, međutim, vektor polarizacije zaklapa proizvoljni ugao $\theta$ u odnosu na x-osu (kao na slici 6.1), intenzitet propuštenog snopa određen je tzv. Malusovim zakonom (Étienne-Louis Malus)

$$I' = I \cos^2\theta. \tag{6.4}$$

Ovaj rezultat se lako objašnjava tretirajući svetlost kao polarizovan ravan elektromagnetni talas. Upadni snop je tada okarakterisan električnim poljem oblika[2]

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}_0 \boldsymbol{\epsilon}\, e^{i(kz-\omega t)}, \tag{6.5}$$

gde je $\mathcal{E}_0$ njegova amplituda, a ort

$$\boldsymbol{\epsilon} = \cos\theta\, \mathbf{e}_x + \sin\theta\, \mathbf{e}_y \tag{6.6}$$

određuje pravac polarizacije upadnog snopa. Intenzitet svetlosti $I$ proporcionalan je kvadratu modula polja $|\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)|^2 = |\mathcal{E}_0|^2$. Propušteni snop će, međutim, biti polarizovan duž x-ose pošto kroz analizator prolazi samo x-komponenta električnog polja

$$\mathcal{E}'(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}_0 \cos\theta\, \mathbf{e}_x\, e^{i(kz-\omega t)}. \tag{6.7}$$

Prema tome, intenzitet propuštenog snopa je $I' \sim |\mathcal{E}'(\mathbf{r}, t)|^2 = |\mathcal{E}_0|^2 \cos^2\theta$, odakle sledi relacija (6.4).

Razmotrimo ovaj rezultat sa stanovišta pojedinačnih fotona. Kao prvo, naglasimo da, ako je snop svetlosti potpuno polarizovan duž nekog pravca, tada su svi fotoni koji čine snop polarizovani u tom pravcu. Ovaj zaključak sledi iz rezultata eksperimenata sa fotoelektričnim efektom dobijenim koristeći polarizovanu svetlost. Pokazalo se da se elektroni u tom slučaju emituju sa ugaonom raspodelom koja zavisi od pravca polarizacije upadnog snopa. Pošto u fotoelektričnom efektu pojedinačni fotoni izbacuju pojedinačne elektrone, proizilazi da svakom fotonu moramo pripisati polarizaciju, tj. da se svaki foton nalazi u izvesnom *stanju polarizacije*. Druga važna činjenica jeste da se fotoni uvek detektuju kao cele čestice. Dakle, za svaki foton koji naiđe na analizator postoje samo dve mogućnosti – ili će proći kroz analizator ili će biti apsorbovan. Tada rezultat (6.4) znači da je od ukupnog broja fotona $N$ iz upadnog snopa njih $N\cos^2\theta$ prošlo kroz analizator i da je, prema tome, $N\sin^2\theta$ fotona apsorbovano. Pri tome nije moguće predvideti sa sigurnošću da li će upadni foton proći ili će biti apsorbovan, osim u slučajevima $\theta = 0$ i $\theta = \pi/2$, kada svi fotoni prolaze kroz analizator, odnosno kada se svi apsorbuju. Sve što možemo reći jeste da svaki foton ima verovatnoću $\mathcal{P}' = \cos^2\theta$ da prođe kroz analizator i verovatnoću $\mathcal{P}'' = \sin^2\theta$ da bude apsorbovan.

Ove verovatnoće, očigledno, u direktnoj su vezi sa koeficijentima koji stoje uz ortove $\mathbf{e}_x$ i $\mathbf{e}_y$ pri dekompoziciji vektora polarizacije (6.6). Pre svega, uočimo da, ako je $\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{e}_x$, prolazak fotona kroz analizator gore izabrane orijentacije je siguran događaj ($\mathcal{P}' = 1$), a njegova apsorpcija nemoguć događaj ($\mathcal{P}'' = 0$), dok je u slučaju $\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{e}_y$ situacija obrnuta. Međutim, ako vektor polarizacije $\boldsymbol{\epsilon}$ ima proizvoljan pravac (6.6), vidimo da je verovatnoća svakog od dva moguća događaja (prolazak ili apsorpcija

[2] Za razliku od talasne funkcije, koja je suštinski kompleksna funkcija, fizički smisao ima samo realni deo talasa (6.5) ($\mathrm{Re}[\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)] = \mathcal{E}_0\boldsymbol{\epsilon}\cos(kz - \omega t)$), a kompleksna notacija koristi se iz praktičnih razloga.

fotona) jednaka *kvadratu apsolutne vrednosti koeficijenta* koji stoji uz ort za koji je taj događaj siguran. Pri tome je zadovoljen uslov da suma verovatnoća svih mogućih događaja bude jednaka jedinici ($\mathcal{P}' + \mathcal{P}'' = 1$). Ova analiza pokazuje da se *stanje polarizacije fotona može adekvatno opisati vektorom (ortom) polarizacije* $\boldsymbol{\epsilon}$ i da se izraz (6.6) može interpretirati kao superpozicija stanja reprezentovanih ortovima $\mathbf{e}_x$ i $\mathbf{e}_y$ za koja su prolazak odnosno apsorpcija fotona respektivno sigurni događaji[3]. Prema tome, prostor stanja linearne polarizacije fotona jeste sama ravan polarizacije, dakle dvodimenzioni realni (euklidski) prostor.

Ovaj prostor, međutim, nije dovoljan ako na analogan način želimo da opišemo stanja fotona sa cirkularnom ili eliptičnom polarizacijom. Na primer, električno polje cirkularno polarizovanog elektromagnetnog talasa može se predstaviti izrazom (6.5) jedino ako uvedemo kompleksni ort polarizacije oblika $\boldsymbol{\epsilon} = (\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y)/\sqrt{2}$ (znak „+" ili „–" ispred imaginarne jedinice odgovara levo, odnosno desno cirkularno polarizovanom talasu). Koristeći ort ovog oblika javlja se fazna razlika od $\mp\pi/2$ između x i y-komponente električnog polja, što dovodi do cirkularne polarizacije[4]. Prema tome, da bismo opisali stanja nelinearne polarizacije fotona vektorima koji imaju oblik superpozicije ortova $\mathbf{e}_x$ i $\mathbf{e}_y$, neophodno je dozvoliti da koeficijenti u superpoziciji uzimaju kompleksne vrednosti. Dakle, prostor stanja polarizacije fotona u opštem slučaju jeste dvodimenzioni kompleksni (unitarni) prostor.

### 6.1.3 Promena stanja fotona pri merenju polarizacije

Razmotrimo na kraju stanje polarizacije fotona koji su u gore opisanom eksperimentu prošli kroz analizator. Prema elektromagnetnoj teoriji, svetlost je nakon prolaska kroz analizator, koji je orijentisan kao na slici 6.1, potpuno polarizovana u pravcu orta $\mathbf{e}_x$ (izraz (6.7)). Ovo se lako proverava eksperimentalno ako iza analizatora stavimo drugi, isti takav i jednako orijentisan analizator. Snop, koji je kroz prvi analizator prošao uz smanjenje intenziteta određeno Malusovim zakonom (6.4), kroz drugi analizator proći će bez promene intenziteta. U okviru čestične slike ovo znači da svi fotoni koji prođu kroz prvi analizator proći će i kroz drugi. Prema tome, bez obzira na to u kom su pravcu bili prethodno polarizovani, fotoni koji prođu kroz analizator biće polarizovani isključivo u pravcu orta $\mathbf{e}_x$[5].

Poslednji zaključak izražava činjenicu o kojoj smo diskutovali u više navrata u prvom delu ovog kursa (Kvantna mehanika 1), a to je da svako merenje izvršeno na mikroskopskom (kvantnom) sistemu suštinski remeti (menja) stanje tog sistema. U gornjem primeru kvantni sistem na kome se vrši merenje je foton, a merni instrument je analizator sa detektorom fotona postavljenim iza njega. U ovom slučaju, kao što smo videli, moguća su dva rezultata merenja (događaja): merni instrument registruje ili prolazak fotona ili apsorpciju fotona. Pre prolaska kroz analizator svi fotoni snopa nalaze se u stanju okarakterisanom ortom $\boldsymbol{\epsilon}$, a oni koji prođu kroz analizator nalazi-

[3] Ort polarizacije opisuje stanje polarizacije (unutrašnje stanje) fotona. Da bismo dobili kompletno stanje fotona, treba ga dopuniti prostorno-vremenskom komponentom.

[4] Realni deo talasa (6.5) u ovom slučaju ima oblik $\mathrm{Re}[\mathcal{E}(\mathbf{r},t)] = \mathcal{E}_0[\mathbf{e}_x\cos(kz-\omega t) \mp \mathbf{e}_y\sin(kz-\omega t)]/\sqrt{2}$.

[5] Ovo se uopštava na fotone bilo koje prvobitne polarizacije, uključujući i nelinearnu polarizaciju.

će se u stanju okarakterisanom ortom $\mathbf{e}_x$. Prema tome, sam proces merenja dovodi do skokovite promene stanja kvantnog sistema (fotona), a dobijeni rezultat merenja (prolazak fotona kroz analizator) je za svako ponovljeno isto takvo merenje u novodobijenom stanju dalje siguran događaj. Stanje sa ovom osobinom zvali smo *svojstveno stanje* za dobijeni rezultat merenja (v. odeljak 3.4.2). U ovom primeru postoje dva svojstvena stanja fotona i ona su predstavljena ortovima $\mathbf{e}_x$ i $\mathbf{e}_y$, a početno stanje je njihova superpozicija predstavljena izrazom (6.6).

Primetimo da se proizvoljno stanje polarizacije $\boldsymbol{\epsilon}$ može dobiti superpozicijom bilo koja dva nekolinearna vektora koja leže u xy-ravni (koji čak ne moraju biti međusobno ortogonalni), naravno uz drugačije koeficijente. Npr. ako analizator zarotiramo za neki ugao oko z-ose tako da je sada pravac polarizacije svetlosti koju polarizator u potpunosti propušta usmeren duž neke x′-ose, svi fotoni koji prođu kroz analizator nalaziće se u stanju okarakterisanom ortom $\mathbf{e}_{x'}$. U ovom slučaju, umesto dekompozicije (6.6), možemo pisati $\boldsymbol{\epsilon} = \cos\theta' \mathbf{e}_{x'} + \sin\theta' \mathbf{e}_{y'}$. Prema tome, moguće su različite dekompozicije istog početnog stanja, uključujući i dekompoziciju po svojstvenim stanjima, pri čemu skup ovih poslednjih zavisi od izbora šta se zapravo meri.

U prethodna dva odeljka analizirali smo jednostavan primer kvantnog merenja na kome smo mogli videti kako se opšti principi i koncepti kvantne mehanike ispoljavaju koristeći vektorski opis stanja. U nastavku ćemo predstaviti opšti formalizam u kome su kvantna stanja predstavljena vektorima iz apstraktnog Hilbertovog prostora, koristeći naročito pogodnu Dirakovu notaciju (Paul Adrien Maurice Dirac).

## 6.2 Dirakova notacija

### 6.2.1 Ket i bra vektori. Skalarni proizvod

Sledeći Dirakovu notaciju, vektor iz apstraktnog Hilbertovog prostora koji predstavlja neko kvantno stanje ćemo pisati u obliku $|\psi\rangle$ i zvati *ket vektor* ili *ket*. Simbol unutar zagrada (ovde je to uobičajena oznaka za talasnu funkciju $\psi$) u principu može biti proizvoljno izabran. U nekim slučajevima, međutim, pogodno je koristiti oznake koje precizno određuju kvantno stanje. Na primer, vektor svojstvenog stanja opservable $\hat{A}$ koji odgovara nedegenerisanoj svojstvenoj vrednosti $a$ može se obeležiti sa $|\psi_a\rangle$ ili jednostavno sa $|a\rangle$. Više detalja o tome biće izneseno u odeljku 6.2.4.

Za svaka dva keta $|\phi\rangle$ i $|\psi\rangle$ koja pripadaju istom Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$ definisan je skalarni proizvod $(|\phi\rangle, |\psi\rangle)$ koji je u opštem slučaju kompleksan broj (v. osobine skalarnog proizvoda u odeljku 2.1.4). Uočimo da se, koristeći skalarni proizvod, svakom izabranom ketu $|\phi\rangle$ iz prostora stanja $\mathcal{H}$ može pridružiti jedno preslikavanje $\phi$ ketova $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ u kompleksne brojeve

$$\phi(|\psi\rangle) = (|\phi\rangle, |\psi\rangle). \tag{6.8}$$

Preslikavanje $\phi$ je, prema tome, linearni funkcional[6] definisan na prostoru ketova.

[6]Linearni funkcional je operacija koja vektore preslikava u skalare, a proizvoljnu linearnu kombinaciju vektora u skalar koji je brojno jednak istoj linearnoj kombinaciji skalara koji su likovi tih vektora.

Može se pokazati da skup svih linearnih funkcionala definisanih na prostoru ketova $\mathcal{H}$ takođe čini vektorski prostor. Taj prostor ćemo zvati *dualni prostor* od $\mathcal{H}$ i obeležavati sa $\mathcal{H}^*$, a njegove elemente ćemo zvati *bra vektori*. Pošto je svakom ketu iz $\mathcal{H}$ relacijom (6.8) pridružen jedan linearni funkcional, zaključujemo da je svakom ketu iz $\mathcal{H}$ pridružen jedan bra vektor iz $\mathcal{H}^*$ [7]. Bra vektor (ili kratko *bra*) koji je na taj način pridružen ketu $|\phi\rangle$ obeležavaćemo sa $\langle\phi|$. Koristeći ovaj formalizam, preslikavanje $\phi(|\psi\rangle)$ možemo predstaviti kao delovanje bra vektora $\langle\phi|$ (slično operatoru) na ket vektor $|\psi\rangle$ u obliku $\langle\phi|\psi\rangle$. U tom slučaju ovo preslikavanje zadato je izrazom

$$\langle\phi|\psi\rangle = (|\phi\rangle, |\psi\rangle). \tag{6.9}$$

Na osnovu ove jednakosti skalarni proizvod vektora $|\phi\rangle$ i $|\psi\rangle$ u Dirakovoj notaciji predstavlja se izrazom $\langle\phi|\psi\rangle$. Ako vektore koji ulaze u skalarni proizvod na desnoj strani relacije (6.9) napišemo izostavljajući oznake za ketove, tj. ako jednakost napišemo u obliku $\langle\phi|\psi\rangle = (\phi, \psi)$, vidimo poreklo Dirakove notacije i bra-ket terminologije. Naime, nazivi „bra" i „ket" za prvi, odnosno drugi član u skalarnom proizvodu dolaze od prvog, odnosno drugog sloga engleske reči *bracket* sa značenjem „zagrada".

### 6.2.2 Dejstvo linearnog operatora na ket i bra vektore

Linearni operator $\hat{A}$ svakom ketu $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ pridružuje drugi ket $|\psi'\rangle \in \mathcal{H}$. Pisaćemo

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle. \tag{6.10}$$

Kao što je uobičajeno, operator na ket vektore deluje sleva nadesno.

Matrični element operatora $\hat{A}$ između vektora $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ definisan je skalarnim proizvodom $(|\phi\rangle, \hat{A}|\psi\rangle)$ koji u Dirakovoj notaciji, na osnovu jednakosti (6.9), pišemo $\langle\phi|(\hat{A}|\psi\rangle)$. Ovaj izraz predstavlja uzastopno delovanje operatora $\hat{A}$ i funkcionala $\phi$ na vektor $|\psi\rangle$, što (analogno uzastopnom delovanju dva operatora) možemo smatrati proizvodom funkcionala i operatora koji deluje na taj vektor. Dakle, možemo pisati

$$(|\phi\rangle, \hat{A}|\psi\rangle) = \langle\phi|(\hat{A}|\psi\rangle) = (\langle\phi|\hat{A})|\psi\rangle. \tag{6.11}$$

Pošto je matrični element kompleksan broj, sledi da proizvod $\langle\phi|\hat{A}$ deluje na ket $|\psi\rangle$ kao linearni funkcional, tj. predstavlja neki bra vektor $\langle\phi'| \in \mathcal{H}^*$. Dakle

$$\langle\phi|\hat{A} = \langle\phi'|. \tag{6.12}$$

Prema tome, za razliku od delovanja na ketove, operatori na bra vektore deluju zdesna nalevo. Primetimo, takođe, da položaj malih zagrada u krajnjem izrazu za matrični element (6.11) nije od značaja, pa se one u principu izostavljaju

$$(|\phi\rangle, \hat{A}|\psi\rangle) = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle. \tag{6.13}$$

[7] U opštem slučaju prostor stanja $\mathcal{H}$ i njegov dualni prostor $\mathcal{H}^*$ nisu izomorfni. Naime, iako svakom ketu iz $\mathcal{H}$ odgovara bra iz $\mathcal{H}^*$, obratno ne važi (sem kada je $\mathcal{H}$ konačnodimenzioni prostor). Ako, međutim, umesto prostora stanja $\mathcal{H}$ posmatramo njegov natprostor, koji, pored vektora iz $\mathcal{H}$, sadrži i uopštene vektore (tzv. opremljeni Hilbertov prostor, v. odeljak 2.2.6), onda će svakom bra vektoru odgovarati jedan ket vektor iz ovog natprostora. Više o ovom problemu može se pročitati u prvom tomu knjige „Kvantna mehanika" Koen-Tanuđija (C. Cohen-Tannoudji) i koautora (bibl. ref. I.2).

### 6.2.3 Ermitska konjugacija

U poglavlju 2.2, koristeći operaciju skalarnog proizvoda, uveli smo pojam adjungovanog operatora (odeljak 2.2.3). Naime, svakom linearnom operatoru $\hat{A}$ koji deluje u unitarnom ili Hilbertovom prostoru, zahvaljujući definisanom skalarnom proizvodu, relacija (2.53) pridružuje odgovarajući adjungovani operator $\hat{A}^{+}$. Operator $\hat{A}^{+}$ naziva se takođe ermitski konjugovan operator operatora $\hat{A}$. U istom odeljku navedene su najvažnije osobine operacije adjungovanja (relacije (2.54)-(2.57)).

Na osnovu relacija (2.55) i (2.56) sledi da se delovanje ove operacije proširuje i na skalare, pri čemu adjungovanje skalara znači njegovo kompleksno konjugovanje. Uopštenu operaciju adjungovanja u nastavku ćemo zvati *ermitska konjugacija* i označavati simbolom (+). Prema tome, ako je $\lambda$ skalar, a $\hat{A}$ linearni operator, onda je

$$\lambda^{(+)} \equiv \lambda^{*}, \quad \hat{A}^{(+)} \equiv \hat{A}^{+}. \tag{6.14}$$

Pojam ermitske konjugacije dalje se uopštava proširujući svoje dejstvo na vektore. Da bismo operaciju definisali u toj oblasti, pokazaćemo da važi

$$|\psi'\rangle = \lambda|\psi\rangle \;\Rightarrow\; \langle\psi'| = \lambda^{*}\langle\psi|, \tag{6.15}$$

$$|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \;\Rightarrow\; \langle\psi'| = \langle\psi|\hat{A}^{+}. \tag{6.16}$$

Obe implikacije se dokazuju koristeći osobine skalarnog proizvoda:

(i) Neka je $|\psi'\rangle = \lambda|\psi\rangle$. Tada $\forall|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ važi $(|\psi'\rangle, |\phi\rangle) = (\lambda|\psi\rangle, |\phi\rangle) = \lambda^{*}(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$, pri čemu je iskorištena osobina antilinearnosti skalarnog proizvoda po prvom članu. Koristeći relaciju (6.9) dalje možemo pisati $\langle\psi'|\phi\rangle = \lambda^{*}\langle\psi|\phi\rangle$, odakle, zbog proizvoljnosti vektora $|\phi\rangle$, sledi izraz na desnoj strani implikacije (6.15).

(ii) Ako je $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$, tada $\forall|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ važi $(|\psi'\rangle, |\phi\rangle) = (\hat{A}|\psi\rangle, |\phi\rangle) = (|\psi\rangle, \hat{A}^{+}|\phi\rangle)$, gde je primenjena definicija adjungovanog operatora: $(\phi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^{+}\phi, \psi)$ (relacija (2.53)). Na osnovu relacija (6.9) i (6.11) sledi $\langle\psi'|\phi\rangle = \langle\psi|(\hat{A}^{+}|\phi\rangle) = (\langle\psi|\hat{A}^{+})|\phi\rangle$, a time i izraz na desnoj strani implikacije (6.16).

Ako, s druge strane, izraze na levoj strani (pretpostavke) implikacija (6.15) i (6.16) ermitski konjugujemo, koristeći pri tome relacije (6.14) i pretpostavljajući da osobina (2.56) i dalje važi, dobićemo

$$|\psi'\rangle = \lambda|\psi\rangle \;\Rightarrow\; |\psi'\rangle^{(+)} = \lambda^{*}|\psi\rangle^{(+)}, \tag{6.17}$$

$$|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \;\Rightarrow\; |\psi'\rangle^{(+)} = |\psi\rangle^{(+)}\hat{A}^{+}. \tag{6.18}$$

Poređenjem relacija (6.15) i (6.17), odnosno relacija (6.16) i (6.18), sledi

$$|\psi\rangle^{(+)} \equiv \langle\psi|, \quad \langle\psi|^{(+)} \equiv |\psi\rangle. \tag{6.19}$$

Prema tome, *za ket $|\psi\rangle$ i odgovarajući bra $\langle\psi|$ možemo reći da su uzajamno ermitski konjugovani.*

Relacije (6.14), (6.19) i (2.56) čine skup pravila koja nam omogućavaju da formalno odredimo ermitski konjugovan izraz bilo kog izraza koji se sastoji od skalara, ket vektora, bra vektora i operatora. Dakle, pri ermitskom konjugovanju nekog izraza treba primeniti sledeća pravila:

(a) zameniti skalare njihovim kompleksno konjugovanim vrednostima,
(b) zameniti ket vektore bra vektorima i obratno,
(c) zameniti operatore njihovim adjungovanim operatorima,
(d) izmeniti redosled faktora u proizvodu.

Kao primer navešćemo određivanje kompleksno konjugovane vrednosti matričnog elementa $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$. Koristeći osobine skalarnog proizvoda i definiciju adjungovanog operatora, sledi

$$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^* \equiv (\phi, \hat{A}\psi)^* = (\hat{A}\psi, \phi) = (\psi, \hat{A}^+\phi) \equiv \langle\psi|\hat{A}^+|\phi\rangle. \tag{6.20}$$

Isti rezultat se dobija koristeći pravila ermitske konjugacije

$$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^* \equiv \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^{(+)} = (\hat{A}|\psi\rangle)^{(+)}\langle\phi|^{(+)} = |\psi\rangle^{(+)}\hat{A}^{(+)}\langle\phi|^{(+)} \equiv \langle\psi|\hat{A}^+|\phi\rangle. \tag{6.21}$$

### 6.2.4 Označavanje svojstvenih vektora opservabli

U prvom delu ovog kursa (druga i treća glava) videli smo da se fizičkim veličinama pridružuju ermitski (autoadjungovani) operatori, tačnije uža klasa ovih operatora koji imaju osobinu da svojstveni vektori svakog od njih obrazuju potpun ortonormirani skup (svojstveni bazis) u prostoru stanja $\mathcal{H}$ i koje nazivamo *opservablama* (v. odeljke 2.2.5 i 3.3.2). Takođe smo videli da su svojstvene vrednosti opservabli uvek realne i da za datu opservablu njihov skup (spektar) može biti diskretan (prebrojiv), neprekidan (neprebrojiv) ili mešovit. Pri tome, svojstvene vrednosti mogu biti nedegenerisane ili degenerisane (v. odeljak 2.2.4).

Ako je spektar opservable $\hat{A}$ nedegenerisan (tzv. kompletna opservabla, v. odeljak 3.4.11), njene svojstvene vrednosti $a$ jednoznačno (do na fazni faktor) određuju odgovarajuće svojstvene vektore koje u Dirakovoj notaciji možemo označiti sa $|\psi_a\rangle$ ili sa $|a\rangle$. U ovom drugom slučaju svojstveni problem opservable $\hat{A}$ pišemo u obliku

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle. \tag{6.22}$$

Skup vektora koji su rešenja ove jednačine, prema definiciji opservable, ortogonalan je i potpun i možemo ih sve normirati na jedinicu (ako je spektar diskretan) ili na delta funkciju (ako je spektar neprekidan). Tada za dva proizvoljna svojstvena vektora $|a\rangle$ i $|a'\rangle$ u slučaju diskretnog spektra važi

$$\langle a|a'\rangle = \delta_{aa'}, \tag{6.23}$$

dok u slučaju neprekidnog spektra imamo

$$\langle a|a'\rangle = \delta(a - a'). \tag{6.24}$$

Specijalno u slučaju diskretnog (i nedegenerisanog) spektra svojstvene vrednosti i svojstvena stanja mogu se jednoznačno okarakterisati nekim kvantnim brojem $n$. Tada svojstvene vektore koji odgovaraju svojstvenim vrednostima $a_n$ možemo označiti sa $|\psi_n\rangle$, $|a_n\rangle$ ili $|n\rangle$. Koristeći poslednju oznaku, svojstveni problem opservable $\hat{A}$ glasi

$$\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle, \tag{6.25}$$

a ako su svojstveni vektori normirani, uz to imamo

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}. \tag{6.26}$$

Ukoliko je spektar opservable $\hat{A}$ degenerisan (što znači da $\hat{A}$ nije kompletna opservabla, v. odeljak 3.4.11), svojstveni vektori nisu jednoznačno određeni svojstvenim vrednostima te opservable, te se ona mora dopuniti do kompletnog skupa kompatibilnih (komutirajućih) opservabli i posmatrati zajednički svojstveni problem. Ako je $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}\}$ neki kompletan skup kompatibilnih opservabli u prostoru stanja i ako su $a$, $b$, $c$ svojstvene vrednosti tih opservabli koje odgovaraju jednom njihovom zajedničkom svojstvenom vektoru, onda ove vrednosti jednoznačno (do na fazni faktor) određuju taj vektor i on se u tom slučaju može označiti sa $|a, b, c\rangle$. Zajednički svojstveni problem ovog skupa tada pišemo u obliku

$$\begin{aligned} \hat{A}|a, b, c\rangle &= a|a, b, c\rangle, \\ \hat{B}|a, b, c\rangle &= b|a, b, c\rangle, \\ \hat{C}|a, b, c\rangle &= c|a, b, c\rangle. \end{aligned} \tag{6.27}$$

Zajednički svojstveni vektori kompletnog skupa kompatibilnih opservabli takođe su međusobno ortogonalni, a njihovo normiranje zavisi od tipa pridruženih svojstvenih vrednosti. Npr. ako opservabla $\hat{A}$ ima čisto neprekidan spektar, a opservable $\hat{B}$ i $\hat{C}$ imaju čisto diskretan spektar, njihovi zajednički svojstveni vektori normiraju se tako da za svaka dva vektora $|a, b, c\rangle$ i $|a', b', c'\rangle$ važi $\langle a, b, c|a', b', c'\rangle = \delta(a - a')\delta_{bb'}\delta_{cc'}$.

Ako su spektri opservabli koje čine kompletan skup svi diskretni, njihove svojstvene vrednosti, a time i svojstveni vektori, mogu se okarakterisati skupovima kvantnih brojeva. U tom slučaju zajednički svojstveni vektor gore navedenog skupa opservabli možemo pisati u obliku $|l, m, n\rangle$, gde su $l, m, n$ kvantni brojevi koji karakterišu svojstvene vrednosti $a_l$, $b_m$, $c_n$, a zajednički svojstveni problem glasi

$$\begin{aligned} \hat{A}|l, m, n\rangle &= a_l|l, m, n\rangle, \\ \hat{B}|l, m, n\rangle &= b_m|l, m, n\rangle, \\ \hat{C}|l, m, n\rangle &= c_n|l, m, n\rangle. \end{aligned} \tag{6.28}$$

Pri tome, ako su zajednički svojstveni vektori normirani na jedinicu, za bilo koja dva vektora $|l, m, n\rangle$ i $|l', m', n'\rangle$ važi $\langle l, m, n|l', m', n'\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta_{nn'}$.

Ukoliko su spektri opservabli koje čine kompletan skup različiti ili mešoviti, moguće su različite kombinacije u označavanju njihovih zajedničkih svojstvenih vektora. Tako, ako opservabla $\hat{A}$ ima čisto neprekidan spektar, a opservable $\hat{B}$ i $\hat{C}$ imaju čisto diskretan spektar, vektori $|a, b, c\rangle$ se alternativno mogu označiti sa $|a, m, n\rangle$.

### 6.2.5 Projektori

Uvođenjem bra i ket vektora operacija skalarnog proizvoda predstavljena je na način blizak operatorskom formalizmu (operacija nad vektorom = delovanje operatora na taj vektor). Naime, na osnovu relacije (6.9) skalarni proizvod ketova $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ može se predstaviti kao rezultat delovanja bra $\langle\phi|$ (koji je u dualnom prostoru $\mathcal{H}^*$ vektor, a u $\mathcal{H}$ deluje kao linearni funkcional) na ket $|\psi\rangle$, koje pišemo u obliku $\langle\phi|\psi\rangle$. Postavlja se, međutim, pitanje ima li neko značenje u okviru tog formalizma izraz sa obrnutim redosledom ova dva vektora, dakle proizvod $|\psi\rangle\langle\phi|$. Delovanje ovog izraza na proizvoljni ket $|\chi\rangle \in \mathcal{H}$ razlaže se na uzastopno delovanje prvo bra $\langle\phi|$ na ket $|\chi\rangle$, a zatim keta $|\psi\rangle$ na dobijeni skalar, tj. $(|\psi\rangle\langle\phi|)|\chi\rangle = |\psi\rangle(\langle\phi|\chi\rangle)$. Krajnji rezultat je ket $|\psi\rangle$ pomnožen skalarom $\langle\phi|\chi\rangle$, što je opet neki ket iz $\mathcal{H}$. Prema tome, izraz $|\psi\rangle\langle\phi|$ deluje na proizvoljni ket kao operator.

Posmatrajmo sada operator definisan proizvodom

$$\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|, \tag{6.29}$$

gde je ket $|\psi\rangle$ (a time i bra $\langle\psi|$) vektor jedinične norme, tj. $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Ako je $|\phi\rangle$ proizvoljni ket iz $\mathcal{H}$, imamo

$$\hat{P}_\psi|\phi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle|\psi\rangle. \tag{6.30}$$

Rezultat delovanja operatora $\hat{P}_\psi$ na proizvoljni ket $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ je, dakle, ket proporcionalan ketu $|\psi\rangle$, pri čemu je koeficijent proporcionalnosti skalarni proizvod $\langle\psi|\phi\rangle$. Geometrijsko značenje ovog rezultata je ortogonalna projekcija vektora $|\phi\rangle$ na vektor $|\psi\rangle$, zbog čega se $\hat{P}_\psi$ naziva *projektor na ket* $|\psi\rangle$. Da ovaj operator zaista spada u projektore, potvrđuje osobina idempotentnosti (v. poglavlje 2.2, relacija (2.62))

$$\hat{P}_\psi^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{P}_\psi, \tag{6.31}$$

koja sledi iz normiranosti keta $|\psi\rangle$ na jedinicu.

Neka je dalje $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \ldots, |\phi_n\rangle$ neki skup ortonormiranih vektora koji pripadaju Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$. Prema tome,

$$\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}, \quad i, j = 1.2, \ldots, n. \tag{6.32}$$

Tada na osnovu definicije (6.29) možemo uvesti $n$ odgovarajućih projektora

$$\hat{P}_i = |\phi_i\rangle\langle\phi_i|, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{6.33}$$

Svaki od njih sve vektore gore navedenog skupa, sem vektora kojem je pridružen, projektuje u nulti vektor, tj.

$$\hat{P}_i|\phi_j\rangle = |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}|\phi_i\rangle. \tag{6.34}$$

Navedeni skup vektora $|\phi_i\rangle$ obrazuje potprostor dimenzije $n$ u prostoru $\mathcal{H}$. Označimo ovaj potprostor sa $V$ i uvedimo operator

$$\hat{P}_V = \sum_{i=1}^{n} |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \equiv \sum_{i=1}^{n} \hat{P}_i. \tag{6.35}$$

Pošto je

$$\hat{P}_V^2 = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\phi_j\rangle\langle\phi_j| = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} |\phi_i\rangle\delta_{ij}\langle\phi_j| = \sum_{i=1}^{n} |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \hat{P}_V, \tag{6.36}$$

sledi da je operator $\hat{P}_V$ takođe projektor i nazivamo ga *projektor na potprostor* $V$.

### 6.2.6 Relacija zatvorenosti

Neka je skup ketova $\{\ldots, |u_i\rangle, \ldots\}$ jedan diskretan bazis u Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$, a skup $\{\ldots, |w_\alpha\rangle, \ldots\}$ jedan neprekidan bazis u istom prostoru (čiji elementi, međutim, pripadaju odgovarajućem opremljenom Hilbertovom prostoru, v. odeljak 2.2.6) i neka su ovi bazisi ortonormirani, tj. $\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij}$ i $\langle w_\alpha|w_\beta\rangle = \delta(\alpha-\beta)$. Proizvoljni vektor stanja $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ razvija se u njima na sledeće načine

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i|u_i\rangle, \tag{6.37}$$

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}\alpha\, c(\alpha)|w_\alpha\rangle. \tag{6.38}$$

Množeći ove jednakosti s leve strane sa $\langle u_j|$, odnosno sa $\langle w_\beta|$, te koristeći ortonormiranost bazisa, sledi $\langle u_j|\psi\rangle = \sum_i c_i\langle u_j|u_i\rangle = \sum_i c_i\delta_{ji} = c_j$ i $\langle w_\beta|\psi\rangle = \int \mathrm{d}\alpha\, c(\alpha)\langle w_\beta|w_\alpha\rangle = \int \mathrm{d}\alpha\, c(\alpha)\delta(\beta-\alpha) = c(\beta)$. Dakle

$$c_i = \langle u_i|\psi\rangle, \tag{6.39}$$

$$c(\alpha) = \langle w_\alpha|\psi\rangle. \tag{6.40}$$

Zamenjujući u razvojima (6.37) i (6.38) koeficijente $c_i$ i $c(\alpha)$ ovim izrazima, sledi

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i|u_i\rangle = \sum_i \langle u_i|\psi\rangle|u_i\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \left(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\right)|\psi\rangle, \tag{6.41}$$

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}\alpha\, c(\alpha)|w_\alpha\rangle = \int \mathrm{d}\alpha\, \langle w_\alpha|\psi\rangle|w_\alpha\rangle = \int \mathrm{d}\alpha\, |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\psi\rangle = \left(\int \mathrm{d}\alpha\, |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\right)|\psi\rangle. \tag{6.42}$$

Upoređujući krajnje strane ovih jednakosti, zbog proizvoljnosti vektora $|\psi\rangle$ imamo

$$\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \hat{I} \quad \text{ili} \quad \sum_i \hat{P}_i = \hat{I} \tag{6.43}$$

i

$$\int \mathrm{d}\alpha\, |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha| = \hat{I}, \tag{6.44}$$

gde je $\hat{I}$ jedinični operator u prostoru $\mathcal{H}$. Ovi izrazi se nazivaju *relacije zatvorenosti* za diskretni, odnosno neprekidni ortonormirani bazis (v. relacije zatvorenosti (3.133), (3.139) i (3.152) za skupove svojstvenih funkcija opservabli koje deluju u $\mathcal{L}^2$). Relacija zatvorenosti za dati ortonormirani skup vektora predstavlja kriterijum potpunosti tog skupa u prostoru $\mathcal{H}$ i, prema tome, uslov da on bude bazis u ovom prostoru.

Podsetimo se na kraju da bazis u prostoru stanja može biti i mešovit. U tom slučaju on se sastoji od diskretnog svojstvenog podbazisa, čiji su elementi vektori konačne norme $|u_i\rangle$, i od neprekidnog svojstvenog podbazisa, čiji su elementi uopšteni vektori $|w_\alpha\rangle$. Relacija zatvorenosti za takav bazis ima oblik (v. odgovarajuću relaciju zatvorenosti (3.155) u prostoru $\mathcal{L}^2$)

$$\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| + \int \mathrm{d}\alpha\, |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha| = \hat{I}. \tag{6.45}$$

Razvoj proizvoljnog vektora stanja po nekom ortonormiranom bazisu neposredno sledi iz relacije zatvorenosti za taj bazis. Ako npr. izaberemo gore pomenuti mešoviti bazis, imamo

$$|\psi\rangle = \hat{I}|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle + \int \mathrm{d}\alpha\, |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\psi\rangle = \sum_i c_i|u_i\rangle + \int \mathrm{d}\alpha\, c(\alpha)|w_\alpha\rangle, \tag{6.46}$$

gde su $c_i$ i $c(\alpha)$ definisani izrazima (6.39) i (6.40).

### 6.2.7 Spektralna forma opservable

Neka je $\{\ldots, |n\rangle, \ldots\}$ skup svojstvenih vektora (svojstveni bazis) opservable $\hat{A}$ sa čisto diskretnim nedegenerisanim spektrom $\{\ldots, a_n, \ldots\}$. Tada, koristeći relaciju zatvorenosti (6.43), sledi

$$\hat{A} = \hat{A}\hat{I} = \hat{A}\sum_n |n\rangle\langle n| = \sum_n \hat{A}|n\rangle\langle n| = \sum_n a_n|n\rangle\langle n|, \tag{6.47}$$

odnosno

$$\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n. \tag{6.48}$$

Ovaj izraz, odnosno krajnji izraz na desnoj strani jednakosti (6.47), naziva se *spektralna forma opservable* $\hat{A}$.

Ukoliko je spektar opservable $\hat{A}$ diskretan i degenerisan, njena spektralna forma zadržava oblik (6.48), ali operatori $\hat{P}_n$ u tom slučaju predstavljaju projektore na svojstvene potprostore koji odgovaraju svojstvenim vrednostima $a_n$. Ako je $\{\ldots, |u_{nk}\rangle, \ldots\}$ svojstveni bazis opservable $\hat{A}$, ovi projektori imaju oblik

$$\hat{P}_n = \sum_{k=1}^{g_n} |u_{nk}\rangle\langle u_{nk}|, \tag{6.49}$$

gde je $g_n$ stepen degeneracije svojstvene vrednosti $a_n$.

Ako je, međutim, spektar opservable $\hat{A}$ neprekidan (i nedegenerisan), njena spektralna forma ima oblik

$$\hat{A} = \int \mathrm{d}a\, a|a\rangle\langle a|, \tag{6.50}$$

gde su $a$ svojstvene vrednosti opservable, a $|a\rangle$ odgovarajući (uopšteni) svojstveni vektori.

Konačno, ako je spektar opservable $\hat{A}$ mešovit, tj. ako sadrži i diskretne i neprekidne svojstvene vrednosti, $a_n$ odnosno $a$ (radi jednostavnosti pretpostavićemo da su sve nedegenerisane), njena spektralna forma ima oblik

$$\hat{A} = \sum_n a_n |n\rangle\langle n| + \int \mathrm{d}a\, a|a\rangle\langle a|. \tag{6.51}$$

### 6.2.8 Reprezentovanje ket i bra vektora matricama

Ako je skup ketova $\{\ldots, |u_i\rangle, \ldots\}$ diskretan ortonormirani bazis u $\mathcal{H}$, tada u dualnom prostoru $\mathcal{H}^*$ postoji odgovarajući bazis braova $\{\ldots, \langle u_i|, \ldots\}$. Svaki ket $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ i njemu pridruženi bra $\langle\psi| \in \mathcal{H}^*$ onda se razvijaju u prvom, odnosno drugom bazisu, pri čemu su ti razvoji u relaciji preko pravila ermitske konjugacije (v. odeljak 6.2.3)

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \;\longleftrightarrow\; \langle\psi| = \sum_i c_i^* \langle u_i|. \tag{6.52}$$

Pri tome su $c_i = \langle u_i|\psi\rangle$ (izraz (6.39)) i $c_i^* = \langle u_i|\psi\rangle^* = \langle\psi|u_i\rangle$.

Zbog jednoznačnosti razvoja, ket $|\psi\rangle$ se u bazisu $\{\ldots, |u_i\rangle, \ldots\}$ reprezentuje matricom kolonom čiji su elementi koeficijenti $c_i$ (v. odeljak 2.1.3 i relaciju (2.21)), tj.

$$|\psi\rangle \;\rightarrow\; \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{6.53}$$

Pokazaćemo da se njemu pridruženi bra $\langle\psi|$ u tom istom bazisu reprezentuje matricom vrstom sa odgovarajućim kompleksno konjugovanim elementima, tj.

$$\langle\psi| \;\rightarrow\; (c_1^*\, c_2^* \,\cdots). \tag{6.54}$$

U tom cilju posmatrajmo dva keta $|\psi\rangle, |\psi'\rangle \in \mathcal{H}$ i njihove razvoje u istom bazisu, dakle razvoj (6.37) (ili razvoj na levoj strani relacije (6.52)) i razvoj

$$|\psi'\rangle = \sum_i c_i' |u_i\rangle, \tag{6.55}$$

gde su $c_i' = \langle u_i|\psi'\rangle$. Ketovi $|\psi\rangle$ i $|\psi'\rangle$ u datom bazisu reprezentuju se matricama kolonama pridruživanjem (6.53), odnosno

$$|\psi'\rangle \;\rightarrow\; \begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{6.56}$$

Skalarni proizvod ova dva vektora je

$$\langle\psi|\psi'\rangle = \sum_i \sum_j c_i^* c_j' \langle u_i|u_j\rangle = \sum_i \sum_j c_i^* c_j' \delta_{ij} = \sum_i c_i^* c_i' = (c_1^* \; c_2^* \; \cdots) \begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (6.57)$$

Prema tome, bra $\langle\psi|$ se u datom bazisu reprezentuje matricom vrstom $(c_1^* \; c_2^* \; \cdots)$. Uočimo da je ova matrica adjungovana (tj. transponovana i kompleksno konjugovana) matrica matrice kolone kojom je reprezentovan ket $|\psi\rangle$, što je u skladu sa relacijom $\langle\psi| = |\psi\rangle^{(+)}$ (v. odeljak 6.2.3).

## 6.3 Postulati kvantne mehanike

U ovom poglavlju ćemo, koristeći opšti formalizam uveden u prethodnom poglavlju, dati pregled osnovnih principa na kojima se zasniva kvantna mehanika u formi postulata. Te principe smo u prvom delu ovog kursa (Kvantna mehanika 1) uvodili induktivno na osnovu empirijskih činjenica i propratne teorijske analize, i to u različitim fazama kursa u kojima je odgovarajući formalizam bio dovoljno razvijen. Koristeći vektorsko predstavljanje stanja i Dirakovu notaciju sada ih možemo formulisati u opštijem obliku kao minimalni skup postulata iz kojih se, koristeći usvojeni formalizam, razvija celokupna teorija. Prema tome, drugi deo kursa (naredne glave) uglavnom će biti zasnovan na deduktivnom prilazu. U nastavku ćemo predstaviti sedam postulata kvantne mehanike, zaključno sa postulatom o evoluciji kvantnog sistema, a nakon toga biće reči o kvantnoj statistici i mešanim stanjima. VIII postulat, koji se odnosi na princip nerazlikovanja identičnih čestica, o čemu nije bilo reči u prvom delu kursa, biće dat u glavi 12.

### 6.3.1 Opis stanja kvantnog sistema

U prvom delu ovog kursa uveli smo pojam talasne funkcije i formulisali postulat o stanjima prema kome ove funkcije u potpunosti opisuju stanja fizičkog (kvantnog) sistema (v. poglavlje 3.1). Sastavni deo postulata je princip superpozicije, zahvaljujući kome skup talasnih funkcija predstavlja jedan beskonačnodimenzioni vektorski prostor – prostor stanja kvantnog sistema. Videli smo da u cilju računanja verovatnoće norma talasne funkcije mora biti konačna (uslov kvadratne integrabilnosti), što prostor stanja definiše kao funkcionalni Hilbertov prostor $\mathcal{L}^2$ (v. odeljak 2.1.5).

Na početku ove glave (odeljak 6.1.1), međutim, pokazali smo da se, zbog izomorfizma prostora $\mathcal{L}^2$ i apstraktnog Hilbertovog prostora $\mathcal{H}$, kvantna stanja, umesto talasnim funkcijama, mogu predstaviti vektorima iz $\mathcal{H}$. Koristeći vektorsko predstavljanje *postulat o stanjima* može se formulisati na sledeći način:

**I postulat:** Stanje kvantnog sistema predstavljeno je u svakom trenutku nekim vektorom iz prostora stanja tog sistema.

Postulat pre svega zahteva da skup svih stanja kvantnog sistema bude vektorski prostor (prostor stanja), što podrazumeva važenje principa superpozicije. Dakle, svaka linearna kombinacija vektora stanja opet je neki vektor iz istog prostora. Dalje, pošto je prostor stanja po svojoj strukturi Hilbertov prostor: (i) definisan je skalarni proizvod vektora stanja, kao i skalarni proizvod ovih vektora sa uopštenim vektorima iz odgovarajućeg opremljenog Hilbertovog prostora, što omogućava dekompoziciju proizvoljnog stanja po nekom bazisu u tom (ili opremljenom) prostoru; (ii) vektori stanja imaju konačnu normu i uvek se mogu normirati na jedinicu. Obe navedene posledice od suštinskog su značaja pri računanju verovatnoće. Ovde treba naglasiti da vektor stanja, bez obzira na to da li je normiran ili ne, opisuje isto stanje. Generalno, uzima se da on opisuje isto stanje i nakon množenja proizvoljnim kompleksnim brojem. Obično se kaže da je kvantno stanje opisano pravcem (jednodimenzionim potprostorom) u prostoru stanja. Nejednoznačnost do na fazni faktor zadržava se i nakon normiranja vektora. Dakle, dva vektora jedinične norme koji se razlikuju po faznom faktoru predstavljaju isto stanje. Da je ova pretpostavka ispravna, videćemo u nastavku kada budemo naveli ostale postulate. Pokazaće se da rezultat računanja merljivih veličina u kvantnoj mehanici ne zavisi od ovog faktora[8]. U nastavku ćemo za obeležavanje vektora stanja koristiti Dirakovu notaciju, tj. kvantna stanja ćemo predstavljati ket vektorima.

### 6.3.2 Predstavljanje i moguće vrednosti fizičkih veličina u kvantnoj mehanici

**II postulat:** Merljive fizičke veličine u kvantnoj mehanici opisuju se operatorima iz skupa opservabli koji deluju u prostoru stanja kvantnog sistema.

Podsetimo se da je opservabla ermitski operator koji ima osobinu da skup svih njegovih svojstvenih vektora čini ortonormirani bazis u prostoru u kome taj operator deluje. Kao posledica toga, vektor proizvoljnog stanja kvantnog sistema može se razložiti na komponente duž svojstvenih vektora operatora koji opisuje neku fizičku veličinu, tj. može se izraziti kao linearna kombinacija tih vektora.

**III postulat:** Jedini mogući rezultat merenja fizičke veličine jeste neka od svojstvenih vrednosti odgovarajuće opservable.

S obzirom na to da su svojstvene vrednosti ermitskih operatora, a time i opservabli, realne, rezultat merenja fizičke veličine, kao što se i očekuje, uvek je realan broj.

Prethodno pomenuta mogućnost razlaganja vektora stanja po svojstvenim vektorima opservable pridružene fizičkoj veličini koja se meri od presudnog je značaja za računanje verovatnoće dobijanja rezultata merenja određenih III postulatom.

[8] Ovde, međutim, treba imati na umu da, ukoliko se fazni faktori vektora stanja koji ulaze u neku linearnu kombinaciju promene nezavisno jedni od drugih, onda rezultujući vektor opisuje suštinski drugačije stanje pošto se na taj način menjaju koeficijenti u superpoziciji stanja.

### 6.3.3 Postulat o verovatnoćama

**IV postulat (slučaj diskretnog spektra):** Kada se fizička veličina $A$ meri na sistemu u stanju opisanom normiranim vektorom $|\psi\rangle$, verovatnoća da rezultat merenja bude svojstvena vrednost $a_n$ iz diskretnog spektra odgovarajuće opservable $\hat{A}$ iznosi

$$\mathcal{P}(a_n) = \langle\psi|\hat{P}_n|\psi\rangle, \tag{6.58}$$

gde je $\hat{P}_n$ projektor na svojstveni potprostor pridružen svojstvenoj vrednosti $a_n$.

Koristeći relaciju zatvorenosti (6.43), lako se proverava da je suma verovatnoća (6.58) po svim mogućim rezultatima merenja veličine $A$ jednaka jedinici. Naime,

$$\sum_n \mathcal{P}(a_n) = \sum_n \langle\psi|\hat{P}_n|\psi\rangle = \langle\psi|\left(\sum_n \hat{P}_n\right)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{I}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1. \tag{6.59}$$

Ako je svojstvena vrednost $a_n$ *nedegenerisana*, projektor $\hat{P}_n$ ima oblik $|u_n\rangle\langle u_n|$, gde je $|u_n\rangle$ normirani svojstveni vektor opservable $\hat{A}$ pridružen svojstvenoj vrednosti $a_n$. Verovatnoća dobijanja svojstvene vrednosti $a_n$ u tom slučaju data je izrazom

$$\mathcal{P}(a_n) = |\langle u_n|\psi\rangle|^2. \tag{6.60}$$

Primetimo da poslednji izraz nije ništa drugo nego kvadrat modula koeficijenta $c_n = \langle u_n|\psi\rangle$ koji u razvoju vektora $|\psi\rangle$ po svojstvenom bazisu opservable $\hat{A}$ stoji uz svojstveni vektor $|u_n\rangle$. Imamo, dakle, $\mathcal{P}(a_n) = |c_n|^2$, što se poklapa sa izrazom za verovatnoću (3.140) dobijenim u okviru talasne mehanike.

Ukoliko je svojstvena vrednost $a_n$ *degenerisana* $g_n$ puta, odgovarajući projektor ima oblik $\hat{P}_n = \sum_{k=1}^{g_n} |u_{nk}\rangle\langle u_{nk}|$, gde je $\{|u_{nk}\rangle, k = 1, 2, ..., g_n\}$ ortonormirani skup vektora koji predstavlja bazis u svojstvenom potprostoru pridruženom svojstvenoj vrednosti $a_n$. U ovom slučaju verovatnoća dobijanja svojstvene vrednosti $a_n$ glasi

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{k=1}^{g_n} |\langle u_{nk}|\psi\rangle|^2, \tag{6.61}$$

što predstavlja sumu kvadrata modula koeficijenata $c_{nk} = \langle u_{nk}|\psi\rangle$ koji u razvoju vektora $|\psi\rangle$ po svojstvenom bazisu opservable $\hat{A}$ stoje uz svojstvene vektore $|u_{nk}\rangle$ pridružene svojstvenoj vrednosti $a_n$, dakle $\mathcal{P}(a_n) = \sum_{k=1}^{g_n} |c_{nk}|^2$ (izraz (3.142)).

Uočimo da, ako se merenje veličine $A$ vrši u nekom od svojstvenih stanja $|u_{n'}\rangle$ (ili $|u_{n'k'}\rangle$) pridružene opservable $\hat{A}$, onda na osnovu izraza (6.60) (odnosno (6.61)) verovatnoća da se kao rezultat merenja dobije svojstvena vrednost $a_n$ te opservable, zbog ortonormiranosti skupa svojstvenih vektora, iznosi $\mathcal{P}(a_n) = \delta_{nn'}$. Prema tome, ukoliko se sistem nalazi u stanju opisanom svojstvenim vektorom $|u_n\rangle$ (ili $|u_{nk}\rangle$) koji odgovara svojstvenoj vrednosti $a_n$ opservable $\hat{A}$, rezultat merenja veličine $A$ biće pouzdano (tj. sa verovatnoćom $\mathcal{P}(a_n) = 1$) upravo ta svojstvena vrednost. Ako se, međutim, merenje vrši u stanju koje nije svojstveno stanje opservable $\hat{A}$, rezultat $a_n$

nije siguran događaj ($0 \leq \mathcal{P}(a_n) < 1$), pošto rezultat merenja tada može biti i neka druga svojstvena vrednost iste opservable. U primeru merenja polarizacije fotona opisanom u odeljcima 6.1.2 i 6.1.3 slučaj merenja u svojstvenom stanju odgovarao bi uglu između polarizatora i analizatora jednakim nuli, dok poslednji slučaj odgovara proizvoljnom uglu između 0 i $\pi/2$.

**IV postulat (slučaj neprekidnog spektra):** Kada se fizička veličina $A$ meri na sistemu u normiranom stanju $|\psi\rangle$, verovatnoća dobijanja rezultata u intervalu $(a, a + \mathrm{d}a)$ iz neprekidnog spektra odgovarajuće opservable $\hat{A}$ iznosi

$$\mathrm{d}\mathcal{P}(a) = |\langle a|\psi\rangle|^2 \mathrm{d}a, \tag{6.62}$$

gde je $|a\rangle$ svojstveni vektor, normiran na delta funkciju, koji odgovara neprekidnoj svojstvenoj vrednosti $a$ opservable $\hat{A}$.

Koristeći relaciju zatvorenosti (6.44) neposredno sledi da je integral izraza (6.62) po celom spektru opservable $\hat{A}$ jednak jedinici. Naime,

$$\int \mathrm{d}\mathcal{P}(a) = \int \langle\psi|a\rangle\langle a|\psi\rangle \mathrm{d}a = \langle\psi|\left(\int |a\rangle\langle a|\mathrm{d}a\right)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{I}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1. \tag{6.63}$$

Izraz (6.62) predstavlja kvadrat modula Furijeovog koeficijenta $c(a) = \langle a|\psi\rangle$, koji u razvoju vektora $|\psi\rangle$ po neprekidnom svojstvenom bazisu opservable $\hat{A}$ stoji uz svojstveni vektor $|a\rangle$, pomnožen širinom intervala $\mathrm{d}a$. Prema tome, verovatnoća dobijanja rezultata u intervalu $(a, a + \mathrm{d}a)$ jednaka je $\mathrm{d}\mathcal{P}(a) = |c(a)|^2\mathrm{d}a$ (izraz (3.156)).

Veličina $\rho(a) = |c(a)|^2 = |\langle a|\psi\rangle|^2$ naziva se *gustina verovatnoće* dobijanja rezultata $a$ pri merenju fizičke veličine $A$ u stanju $|\psi\rangle$. Integral od $\rho(a)$ na konačnom intervalu $a \in (\alpha, \beta)$ daje verovatnoću dobijanja rezultata merenja veličine $A$ u tom intervalu (izraz (3.158)). Napomenimo i ovde da je verovatnoća dobijanja određene vrednosti $a$ koja pripada neprekidnom spektru opservable $\hat{A}$ jednaka nuli ($\mathcal{P}_{\{a\}} = 0$, izraz (3.159)).

Uočimo na kraju da su svi navedeni izrazi za verovatnoće invarijantni na promenu faznog faktora vektora stanja koji u njih ulaze. Ako npr. napišemo $|\psi'\rangle = e^{i\alpha}|\psi\rangle$ i $|u'_{nk}\rangle = e^{i\alpha_{nk}}|u_{nk}\rangle$, gde $\alpha, \alpha_{nk} \in \mathbb{R}$, imaćemo $\langle\psi'| = e^{-i\alpha}\langle\psi|$ i $\langle u'_{nk}| = e^{-i\alpha_{nk}}\langle u_{nk}|$, što daje $\hat{P}'_n = \hat{P}_n$ i $\langle\psi'|\hat{P}'_n|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{P}_n|\psi\rangle$. Ovo potvrđuje pretpostavku iz odeljka 6.3.1 da vektori koji se razlikuju samo po faznom faktoru predstavljaju isto stanje.

### 6.3.4 Srednja vrednost opservable

Prema III postulatu, vrednosti koje se dobijaju merenjem fizičke veličine $A$ pripadaju isključivo skupu svojstvenih vrednosti (spektru) odgovarajuće opservable $\hat{A}$. Ako se merenje vrši na sistemu u stanju $|\psi\rangle$ i ako opservabla $\hat{A}$ ima čisto diskretan spektar, verovatnoća dobijanja svojstvene vrednosti $a_n$ na osnovu IV postulata određena je izrazom (6.58). Srednja vrednost veličine $A$ tada iznosi

$$\langle A\rangle = \sum_n a_n\mathcal{P}(a_n) = \sum_n a_n\langle\psi|\hat{P}_n|\psi\rangle = \langle\psi|\left(\sum_n a_n\hat{P}_n\right)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle, \tag{6.64}$$

pri čemu je iskorišten izraz (6.48) za spektralnu formu opservable. Isti rezultat se dobija ako opservabla $\hat{A}$ ima čisto neprekidan spektar. Tada je

$$\langle A\rangle = \int a\rho(a)\mathrm{d}a = \int a\langle\psi|a\rangle\langle a|\psi\rangle\mathrm{d}a = \langle\psi|\left(\int a|a\rangle\langle a|\mathrm{d}a\right)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle, \quad (6.65)$$

gde je iskorišten izraz (6.50). Konačno, koristeći izraz (6.51) nije teško pokazati da se isti rezultat dobija i u slučaju mešovitog spektra. Izraz $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ naziva se srednja vrednost opservable $\hat{A}$ u stanju $\psi$ i označava sa $\langle\hat{A}\rangle_\psi$ ili $\langle\hat{A}\rangle$. Prema tome, $\langle A\rangle = \langle\hat{A}\rangle$ [9]. Obratimo pažnju na to da je izraz za srednju vrednost takođe invarijantan na promenu faznog faktora vektora stanja, što ide u prilog pretpostavci da vektori $|\psi\rangle$ i $e^{i\alpha}|\psi\rangle$ predstavljaju isto stanje.

### 6.3.5 Promena stanja kao posledica merenja

**V postulat:** Ako merenje fizičke veličine $A$ na sistemu u stanju $|\psi\rangle$ daje rezultat $a_n$, sistem se neposredno nakon tog merenja nalazi u stanju koje je normirana projekcija stanja $|\psi\rangle$ na svojstveni potprostor pridružen svojstvenoj vrednosti $a_n$. Dakle, dolazi do skokovite promene stanja

$$|\psi\rangle \xrightarrow{a_n} |\psi_n\rangle = \frac{\hat{P}_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\hat{P}_n|\psi\rangle}}. \quad (6.66)$$

Stanje u kome se sistem nalazi nakon merenja može se, takođe, napisati u obliku

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{k=1}^{g_n}|c_{nk}|^2}}\sum_{k=1}^{g_n} c_{nk}|u_{nk}\rangle, \quad (6.67)$$

gde je $g_n$ stepen degeneracije svojstvene vrednosti $a_n$, $\{|u_{nk}\rangle, k = 1, 2, \ldots, g_n\}$ je potpun ortonormirani skup vektora u svojstvenom potprostoru pridruženom toj vrednosti i $c_{nk} = \langle u_{nk}|\psi\rangle$. Pošto svi svojstveni vektori $|u_{nk}\rangle$ koji ulaze u superpoziciju (6.67) odgovaraju istoj svojstvenoj vrednosti $a_n$ opservable $\hat{A}$, i ova superpozicija je svojstveni vektor opservable $\hat{A}$ koji odgovara toj istoj svojstvenoj vrednosti.

Na osnovu V postulata, verovatnoća dobijanja svojstvene vrednosti $a_n$ može se tumačiti i kao *verovatnoća prelaza* iz stanja $|\psi\rangle$ u stanje $|\psi_n\rangle$. Ako su vektori oba stanja normirani, ova verovatnoća je data izrazom (6.58), odnosno izrazima (6.60) i (6.61), ili generalno

$$\mathcal{P}(|\psi\rangle\to|\psi_n\rangle) = |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2. \quad (6.68)$$

Svojstveni vektori $|u_{nk}\rangle$ u principu se određuju dopunjavanjem (nekompletne) opservable $\hat{A}$ do kompletnog skupa kompatibilnih opservabli (v. odeljak 3.4.11) i rešavanjem zajedničkog svojstvenog problema. Ako se izvrši istovremeno merenje odgovarajućih fizičkih veličina, sistem u tom slučaju prelazi u neko od svojstvenih stanja

[9] Izraz $\langle A\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ za srednju vrednost fizičke veličine $A$ često se tretira kao jedan od postulata kvantne mehanike. U tom slučaju izrazi za verovatnoće dobijanja rezultata merenja (IV postulat) predstavljaju njegove posledice.

$|u_{nk}\rangle$ koja su sadržana u superpoziciji (6.67), pri čemu je $\mathcal{P}(|\psi\rangle \to |u_{nk}\rangle) = |c_{nk}|^2$ [10]. Specijalno, ako je rezultat merenja fizičke veličine $A$ *nedegenerisana* svojstvena vrednost $a_n$, sistem će se nakon merenja nalaziti u svojstvenom stanju $|u_n\rangle$ opservable $\hat{A}$ koje odgovara toj svojstvenoj vrednosti, dakle

$$|\psi\rangle \xrightarrow{a_n} |u_n\rangle, \tag{6.69}$$

a verovatnoća prelaza je $\mathcal{P}(|\psi\rangle \to |u_n\rangle) = |c_n|^2 \equiv |\langle u_n|\psi\rangle|^2$.

Promena stanja kvantnog sistema koje je posledica merenja neke fizičke veličine diskutovana je u više navrata u prvom delu ovog kursa (odeljci 1.4.6, 3.4.2, 4.1.5), kao i u nekim od primera (npr. u analizi merenja polarizacije fotona u odeljku 6.1.3). Prihvatljivo objašnjenje ove pojave jeste interakcija kvantnog sistema sa mernim uređajem koja se, za razliku od merenja na makroskopskim sistemima u klasičnoj mehanici, ne može proizvoljno redukovati. Činjenica je, međutim, da do danas nije predstavljena neka zadovoljavajuća teorija koja bi mogla egzaktno da opiše mehanizam te promene i V postulat (kao i ostali) formulisan je na osnovu empirijskih činjenica. U svakom slučaju, uzima se da se početno stanje kvantnog sistema pri merenju neke fizičke veličine skokovito menja prelazeći u svoju projekciju na svojstveni potprostor pridružen dobijenom rezultatu. Pri opisu stanja talasnim funkcijama ovaj kvantni skok zvali smo redukcija talasnog paketa odnosno kolaps talasne funkcije (odeljak 3.4.2).

### 6.3.6 Kanonska kvantizacija

II postulat uvodi jedan od ključnih koncepata kvantnomehaničkog formalizma – operatore fizičkih veličina (opservable). Postupak pridruživanja operatora fizičkim veličinama naziva se kvantizacija (kvantovanje) i obično se navodi kao zaseban postulat. Kvantizacija se može formulisati na različite načine, ali u svim slučajevima u osnovi ima princip korespondencije (v. odeljak 1.2.4).

U okviru opšte formulacije kvantne mehanike najčešće se koristi *kanonska kvantizacija* koju je predložio Dirak. Po njemu, klasičnim dinamičkim varijablama $A$ i $B$ pridružuju se operatori $\hat{A}$ i $\hat{B}$ tako da Puasonova zagrada

$$\{A, B\} \equiv \sum_i \left( \frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i}\frac{\partial A}{\partial p_i} \right), \tag{6.70}$$

u kojoj $q_i$ i $p_i$ predstavljaju nezavisne koordinate fizičkog sistema, odnosno njima konjugovane impulse, prelazi u komutator

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{6.71}$$

po pravilu

$$\{A, B\} \to \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{B}]. \tag{6.72}$$

[10] Uočimo da svojstveno stanje (6.67) preko koeficijenata razvoja $c_{nk}$ zavisi od početnog stanja $|\psi\rangle$, dok je svojstveno stanje $|u_{nk}\rangle$ od njega nezavisno. Istovremeno merenje fizičkih veličina čiji operatori čine kompletan skup kompatibilnih opservabli predstavlja način da se sistem prevede u određeno kvantno stanje (definisano skupom dobijenih vrednosti tih veličina).

Na taj način dobijaju se komutacione relacije koje potpuno određuju osobine i delovanje operatora koji su njima povezani.

Korespondencija (6.72) između Puasonovih zagrada i komutatora može se uočiti poređenjem zakona kretanja u klasičnoj i kvantnoj mehanici, o čemu će biti nešto više reči u odeljku 9.3.6. Treba, međutim, ukazati na to da se kod primene ovog pravila na proizvoljne fizičke veličine mogu pojaviti poteškoće zbog nekomutiranja operatora dinamičkih promenljivih koje ulaze u izraze za te veličine. Poteškoće se ispoljavaju u vidu nejednoznačnosti operatorskog uređenja u izrazima za operatore fizičkih veličina[11].

**VI postulat:** Koordinate $x_i$ i kanonski konjugovani impulsi $p_i$ fizičkog sistema, tj. dinamičke promenljive koje su u klasičnoj mehanici povezane Puasonovim zagradama na sledeći način
$$\{x_i, p_j\} = \delta_{ij}, \tag{6.73}$$
u kvantnoj mehanici predstavljaju se opservablama $\hat{x}_i$ i $\hat{p}_i$, koje su povezane komutacionim relacijama
$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}. \tag{6.74}$$
Opservabla $\hat{A}$, pridružena fizičkoj veličini $A$, koja je funkcija koordinata $x_i$ i impulsa $p_i$, dobija se zamenjujući ove promenljive u pogodno simetrizovanom izrazu za veličinu $A$ operatorima $\hat{x}_i$ i $\hat{p}_i$.

Simetrizacijom se, u stvari, rešava problem nejednoznačnosti uređenja operatora za svaki konkretan slučaj. Potreba za simetrizacijom najčešće se javlja ukoliko izraz za fizičku veličinu sadrži proizvod promenljivih čiji operatori ne komutiraju, npr. proizvod neke od koordinata $x_i$ i kanonski konjugovanog impulsa $p_i$. U odeljku 3.3.4 pokazali smo da proizvod dva ermitska operatora koji ne komutiraju nije ermitski operator. Prema tome, prosta zamena promenljivih odgovarajućim operatorima može imati za posledicu ne samo nejednoznačnost nego i neermitski karakter operatora pridruženog fizičkoj veličini. U istom odeljku pokazano je da, ako su $\hat{B}$ i $\hat{C}$ ermitski operatori, tada su njihovi (anti)simetrizovani proizvodi $\frac{1}{2}(\hat{B}\hat{C} + \hat{C}\hat{B})$ i $i(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B})$ takođe ermitski operatori. Dakle, ukoliko je $[\hat{B}, \hat{C}] \neq 0$, kvantizacija veličine $A = f(BC)$ vrši se tako da se proizvod $BC$ zameni pogodnim simetrizovanim proizvodom odgovarajućih operatora, npr. $\hat{A} = f(\frac{1}{2}(\hat{B}\hat{C} + \hat{C}\hat{B}))$.

U sledećoj glavi na različitim primerima videćemo kako se, koristeći ovaj postulat, može rešiti svojstveni problem opservable u apstraktnom Hilbertovom prostoru, dakle bez prelaska na određenu reprezentaciju. Ovaj tzv. algebarski prilaz prvo ćemo primeniti na rešavanje svojstvenog problema operatora koordinate, a zatim na

[11] Pokazuje se da se vodeći doprinos tj. član linearan po $\hbar$, za koji se pokazuje da je proporcionalan Puasonovoj zagradi, ipak može jednoznačno odrediti. Predložene su različite šeme kvantizacije da bi se nejednoznačnost operatorskog uređenja rešila, od kojih je najpopularnija Vejlova šema (Hermann Weyl). Više detalja o ovom problemu može se naći u knjizi „Lekcije iz kvantne mehanike” M. Burić i D. Latasa (bibl. ref. II.A.1), str. 90. Opisani postupak se iz navedenih razloga ograničava na osnovne dinamičke promenljive, komponente koordinata i kanonski konjugovanih impulsa i to u pravouglom koordinatnom sistemu.

rešavanje svojstvenog problema hamiltonijana linearnog harmonijskog oscilatora. Takođe, u glavi 11 algebarskim prilazom ćemo rešavati zajednički svojstveni problem operatora kvadrata i z-komponente ugaonog momenta.

### 6.3.7 Evolucija kvantnog sistema

**VII postulat:** Vremenska evolucija vektora stanja $|\psi(t)\rangle$ određena je Šredingerovom jednačinom

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle, \tag{6.75}$$

gde je $\hat{H}(t)$ opservabla pridružena energiji sistema (hamiltonijan).

Šredingerova jednačina (Erwin Schrödinger), njeno rešavanje i analiza rešenja, koristeći talasne funkcije za opis kvantnih stanja, detaljno su predstavljeni u četvrtoj glavi. Svi zaključci opšteg karaktera (tj. oni koji nisu vezani za specifičnu reprezentaciju) koji su tamo izvedeni važe i u opštoj formulaciji kvantne mehanike. Ovde ćemo izdvojiti održanje norme vektora stanja u toku vremena i pokazati kako sledi iz Šredingerove jednačine u formi (6.75)

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}||\psi(t)||^2 &\equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|\right)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle = 0. \end{aligned} \tag{6.76}$$

U poglavlju 4.2 videli smo da za konzervativne sisteme (kod kojih hamiltonijan ne zavisi od vremena) postoji klasa rešenja Šredingerove jednačine kod kojih se zavisnost od vremena javlja isključivo preko faznog faktora vektora stanja. To su tzv. stacionarna stanja, koja u Dirakovoj notaciji pišemo $|\phi_{nk}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$. Svojstveni vektori $|\phi_{nk}\rangle$ i energije $E_n$ rešenja su svojstvenog problema hamiltonijana (vremenski nezavisne Šredingerove jednačine)

$$\hat{H}|\phi_{nk}\rangle = E_n|\phi_{nk}\rangle, \quad k = 1, \ldots, g_n. \tag{6.77}$$

S obzirom na to da je skup vektora $\{|\phi_{nk}\rangle; k = 1, \ldots, g_n; \forall n\}$ svojstveni bazis hamiltonijana, opšte rešenje Šredingerove jednačine za te sisteme može se predstaviti u obliku supepozicije stacionarnih stanja

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} c_{nk}|\phi_{nk}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}. \tag{6.78}$$

Pomenimo da Šredingerova jednačina predstavlja tzv. diferencijalni oblik zakona kretanja u kvantnoj mehanici. U glavi 9 ćemo videti da se vremenska evolucija kvantnog sistema može opisati na jedan formalniji način uvodeći evolucioni operator, koji se naziva integralni oblik zakona kretanja.

## 6.4 Kvantna statistika

### 6.4.1 Kvantni ansambli. Čista i mešana stanja

Stanje fizičkog sistema u klasičnoj mehanici u svakom trenutku određeno je vrednostima osnovnih dinamičkih promenljivih tog sistema, tj. vrednostima svih njegovih nezavisnih koordinata i impulsa. Pošto su ostale dinamičke promenljive funkcije ovih osnovnih, u klasičnoj mehanici ne postoji principijelna prepreka da vrednosti svih tih veličina budu poznate istovremeno. Kao što smo videli, u kvantnoj mehanici ovo ne važi zbog principa neodređenosti. Prema postulatu o stanjima (v. odeljak 3.1.1), sve što je moguće saznati o kvantnom sistemu određeno je talasnom funkcijom koja opisuje njegovo stanje. Ovo važi i u opštem formalizmu, gde je stanje kvantnog sistema predstavljeno nekim vektorom iz prostora stanja tog sistema (v. odeljak 6.3.1). Talasne funkcije i vektori stanja, međutim, nisu merljive veličine, pa se informacija o stanju sistema dobija posredno, merenjem nekog skupa fizičkih veličina čiji operatori čine kompletan skup kompatibilnih opservabli za taj sistem (v. odeljak 3.4.11).

Ovde treba naglasiti da proces merenja zapravo prevodi kvantni sistem iz proizvoljnog početnog (poznatog ili nepoznatog) stanja u neko od zajedničkih svojstvenih stanja kompletnog skupa kompatibilnih opservabli[12], što je u principu slučajan proces i jedino što se može predvideti jeste verovatnoća prelaza (v. odeljak 6.3.5). Iz tog razloga prevođenje sistema u unapred zadato kvantno stanje (tzv. preparacija) vrši se merenjem odgovarajućeg skupa fizičkih veličina na *kvantnom ansamblu*, tj. na velikom broju istovetnih kvantnih sistema (v. odeljak 1.4.7), a zatim izdvajanjem onih sistema kod kojih rezultat merenja korespondira zadatom stanju. Na taj način formira se *podansambl* (deo celog ansambla) koji se sastoji od sistema u željenom stanju, a odnos broja sistema u tom podansamblu i ukupnom ansamblu (tzv. relativna frekvencija, v. odeljak 3.2.1) konvergira verovatnoći dobijanja odgovarajućeg rezultata merenja.

Dva kvantna ansambla smatramo *ekvivalentnim* ako merenje istog skupa fizičkih veličina na njima daje jednaku raspodelu verovatnoće po rezultatima merenja. Za kvantni ansambl koji je ekvivalentan svakom svom podansamblu kažemo da je *homogen* ili *čist*, a stanje kvantnog sistema koji pripada tom ansamblu zovemo *čisto stanje*. Očigledno, gore pomenutim postupkom preparacije formira se homogen (pod)ansambl sa sistemima u unapred zadatom čistom kvantnom stanju. Sva stanja koja smo do sada proučavali (u oba dela kursa) spadaju u čista stanja i postulat o stanjima odnosi se na njih. Dakle, možemo reći da se čisto kvantno stanje predstavlja talasnom funkcijom ili vektorom iz prostora stanja kvantnog sistema, pri čemu oba reprezenta nose kompletnu informaciju o sistemu u tom stanju.

U praksi, međutim, informacija o kvantnom sistemu koju nosi talasna funkcija, odnosno vektor stanja, često nije poznata u potpunosti, pa kažemo da stanje kvantnog sistema nije potpuno određeno. Statistički gledano, to znači da sistem sada može biti u različitim stanjima i da, prema tome, odgovarajući kvantni ansambl neće biti

[12] Ovo se dešava i ako skup kompatibilnih opservabli nije kompletan, npr. ako se meri jedna fizička veličina čija opservabla nije kompletna. Međutim, u tom slučaju, za razliku od merenja kompletnog skupa, rezultujuće stanje zavisi i od početnog stanja sistema (relacija (6.67)).

homogen. Najviše što u tom slučaju možemo znati jesu statističke težine homogenih podansambala sastavljenih od sistema u po jednom od zastupljenih stanja. Postavlja se pitanje kako kvantnomehanički formalizam prilagoditi nepotpunom poznavanju stanja kvantnog sistema tako da predviđanje teorije bude u skladu sa eksperimentalnim rezultatima. Uočimo da ovde postoje dva različita uzroka za statističku prirodu rezultata merenja. To su: (i) nekompletna informacija o stanju sistema, koju imamo i u klasičnoj statističkoj fizici, i (ii) neodređenost vezana za sam proces merenja, koja je specifična za kvantnu mehaniku. Potrebno je, dakle, pronaći pogodnu matematičku formu koja na korektan način uračunava oba elementa statističnosti, pri čemu je jasno da to ne može biti talasna funkcija ili vektor stanja. Do tražene forme možemo doći računajući verovatnoću dobijanja određene vrednosti fizičke veličine pri njenom merenju na nehomogenom kvantnom ansamblu.

Kvantni ansambl je *nehomogen* ili *mešan* ako se može dobiti mešanjem (ili, alternativno, ako se može razložiti na) dva ili više neekvivalentnih ansambala. Za kvantni sistem koji pripada takvom ansamblu kažemo da je u *mešanom stanju*. Nehomogeni kvantni ansambl najčešće se formira mešanjem neekvivalentnih homogenih ansambala sa datim statističkim težinama, pa se mešano stanje često naziva i *statistička mešavina (čistih) stanja*. Naglasimo da statističku mešavinu stanja treba strogo razlikovati od njihove superpozicije, koju možemo zvati *koherentnom mešavinom stanja* i koja je takođe čisto stanje. Osnovna razlika među njima je to što u slučaju superpozicije postoji interferencija među različitim čistim stanjima, dok u slučaju statističke mešavine toga nema. Primer mešanog stanja je stanje polarizacije fotona koje emituje izvor prirodne (nepolarizovane) svetlosti (v. odeljak 6.1.2). Snop ovih fotona predstavlja nehomogen ansambl iz koga se pomoću polarizatora može izdvojiti homogen podansambl koji se sastoji od fotona određene polarizacije koja ovde predstavlja čisto stanje.

### 6.4.2 Verovatnoća dobijanja određenog rezultata merenja u mešanom stanju. Operator gustine

Pretpostavimo da je nehomogeni kvantni ansambl dobijen mešanjem $K$ homogenih ansambala sa po $N_k$ sistema ($k = 1, \ldots, K$). Ukupan broj sistema u nehomogenom ansamblu tada je $N = \sum_{k=1}^{K} N_k$, a količnici

$$w_k = \frac{N_k}{N} \tag{6.79}$$

predstavljaju *statističke težine* homogenih (pod)ansambala u ukupnom ansamblu. Očigledno, $w_k$ su realni brojevi koji zadovoljavaju uslove

$$w_k \geq 0, \quad \sum_{k=1}^{K} w_k = 1. \tag{6.80}$$

Pošto se ansambl sastoji od veoma velikog broja sistema, u teorijskom opisu uzimamo da $N_k \to \infty$, $\forall k$ (odakle je takođe $N \to \infty$), što ne utiče na statističke težine, a omogućava opis pomoću verovatnoće.

Verovatnoća da se pri merenju veličine $A$ na $k$-tom podansamblu dobije vrednost $a_n$ po definiciji iznosi (v. odeljak 3.2.1)

$$\mathcal{P}_k(a_n) = \lim_{N_k \to \infty} \frac{N_k^{(n)}}{N_k}, \tag{6.81}$$

gde je $N_k^{(n)}$ broj sistema iz $k$-tog podansambla na kojima je ta vrednost izmerena. Verovatnoća da se ista vrednost izmeri na ukupnom nehomogenom ansamblu je

$$\mathcal{P}(a_n) = \lim_{N \to \infty} \frac{N^{(n)}}{N}, \tag{6.82}$$

gde je $N^{(n)} = \sum_{k=1}^{K} N_k^{(n)}$ broj sistema iz ukupnog ansambla na kojima je vrednost $a_n$ izmerena. Dalje možemo pisati

$$\mathcal{P}(a_n) = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{K} N_k^{(n)} = \lim_{N \to \infty} \sum_{k=1}^{K} \frac{N_k}{N} \frac{n_k}{N_k} = \sum_{k=1}^{K} \lim_{N \to \infty} \frac{N_k}{N} \lim_{N_k \to \infty} \frac{N_k^{(n)}}{N_k}, \tag{6.83}$$

odakle sledi veza među ovim verovatnoćama

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{k=1}^{K} w_k \mathcal{P}_k(a_n). \tag{6.84}$$

Formula (6.84) omogućava nam da odredimo verovatnoću da se pri merenju fizičke veličine $A$ u mešanom stanju dobije određena diskretna vrednost $a_n$, ukoliko su nam poznate verovatnoće dobijanja iste te vrednosti u čistim stanjima u kojima se nalaze sistemi homogenih podansambala u sastavu ukupnog ansambla. Podsetimo se da, prema III postulatu, vrednost $a_n$ može biti samo neka od svojstvenih vrednosti opservable $\hat{A}$ pridružene fizičkoj veličini $A$. Verovatnoća njenog dobijanja u $k$-tom čistom stanju, koje ćemo predstaviti vektorom $|\psi_k\rangle$, na osnovu IV postulata iznosi

$$\mathcal{P}_k(a_n) = \langle \psi_k | \hat{P}_n | \psi_k \rangle. \tag{6.85}$$

Koristeći relaciju zatvorenosti (6.43) za proizvoljni ortonormirani bazis $\{\ldots, |u_i\rangle, \ldots\}$ u prostoru stanja sistema, dalje imamo

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_k(a_n) &= \langle \psi_k | \hat{P}_n \hat{I} | \psi_k \rangle = \langle \psi_k | \hat{P}_n \sum_i |u_i\rangle\langle u_i | \psi_k \rangle \\ &= \sum_i \langle u_i | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \hat{P}_n | u_i \rangle = \mathrm{Tr}\Big( |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \hat{P}_n \Big). \end{aligned} \tag{6.86}$$

Napomenimo da je trag operatora (u ovom slučaju operatorskog izraza $|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\hat{P}_n$), koji se definiše kao suma dijagonalnih matričnih elemenata tog operatora u nekom bazisu (ovde je to $\{\ldots, |u_i\rangle, \ldots\}$), invarijantan u odnosu na izbor bazisa, zbog čega je taj izbor proizvoljan.

Zamenjujući poslednji izraz za $\mathcal{P}_k(a_n)$ u formulu (6.84) i koristeći linearnost traga, dobijamo

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{k=1}^{K} w_k \operatorname{Tr}\left(|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\hat{P}_n\right) = \operatorname{Tr}\sum_{k=1}^{K} w_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|\hat{P}_n, \tag{6.87}$$

odnosno

$$\mathcal{P}(a_n) = \operatorname{Tr}(\hat{\rho}\hat{P}_n), \tag{6.88}$$

pri čemu izraz

$$\hat{\rho} = \sum_{k=1}^{K} w_k|\psi_k\rangle\langle\psi_k| \tag{6.89}$$

predstavlja traženu matematičku formu za opis mešanih stanja i naziva se *operator (ili matrica) gustine*, odnosno statistički operator. Napomenimo da vektori $|\psi_k\rangle$ koji se pojavljuju u izrazu (6.89) moraju biti normirani na jedinicu radi korektnog računanja verovatnoće, ali nije nužno da budu i međusobno ortogonalni.

Ukoliko diskretna svojstvena vrednost $a_n$ nije degenerisana, a vektor pridruženog svojstvenog stanja označimo sa $|\varphi_n\rangle$, odgovarajući projektor glasi $\hat{P}_n = |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$, pa se opšta formula za verovatnoću (6.88) svodi na

$$\mathcal{P}(a_n) = \operatorname{Tr}(\hat{\rho}|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|) = \langle\varphi_n|\hat{\rho}|\varphi_n\rangle. \tag{6.90}$$

Krajnji izraz se dobija koristeći definiciju traga operatora u nekom bazisu i relaciju zatvorenosti za taj bazis.

Ako je, međutim, diskretna svojstvena vrednost $a_n$ degenerisana $g_n$ puta, pridruženi projektor glasi $\hat{P}_n = \sum_{j=1}^{g_n} |\varphi_{nj}\rangle\langle\varphi_{nj}|$, gde je $\{|\varphi_{nj}\rangle, j = 1, \ldots, g_n\}$ ortonormirani skup svojstvenih vektora koji odgovaraju svojstvenoj vrednosti $a_n$, pa se formula (6.88) može napisati u obliku

$$\mathcal{P}(a_n) = \operatorname{Tr}\left(\hat{\rho}\sum_{j=1}^{g_n} |\varphi_{nj}\rangle\langle\varphi_{nj}|\right) = \sum_{j=1}^{g_n}\langle\varphi_{nj}|\hat{\rho}|\varphi_{nj}\rangle. \tag{6.91}$$

Napomenimo da izbor skupa $\{|\varphi_{nj}\rangle, j = 1, \ldots, g_n\}$ nije jednoznačan.

Konačno, ako merimo fizičku veličinu $A$ čiji operator $\hat{A}$ ima nedegenerisan neprekidan spektar, verovatnoća da se pri merenju te veličine na sistemu u mešanom stanju dobije neprekidna svojstvena vrednost $a$ operatora $\hat{A}$ u intervalu širine d$a$ oko te vrednosti iznosi

$$\mathrm{d}\mathcal{P}(a) = \operatorname{Tr}(\hat{\rho}|a\rangle\langle a|)\,\mathrm{d}a = \langle a|\hat{\rho}|a\rangle\,\mathrm{d}a. \tag{6.92}$$

Izraze za verovatnoće (6.88), (6.90), (6.91) i (6.92) možemo smatrati *uopštenjem IV postulata*, koji je originalno formulisan za merenje fizičke veličine na kvantnom sistemu u čistom stanju (izrazi (6.58), (6.60), (6.61) i (6.62), respektivno), na slučaj kada se sistem nalazi u mešanom stanju.

### 6.4.3 Osobine operatora gustine i formalna definicija

Pokazaćemo da je svaki operator oblika (6.89), uz uslove (6.80), pozitivan ermitski operator jediničnog traga.

Da bismo proverili ermitski karakter operatora $\hat{\rho}$ datog izrazom (6.89), treba da odredimo njegov adjungovani operator. Koristeći pravila ermitske konjugacije i činjenicu da su statističke težine $w_k$ realni brojevi, neposredno sledi $\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}$, što znači da je $\hat{\rho}$ ermitski operator.

S druge strane, pozitivan operator se definiše kao operator čija je srednja vrednost uvek nenegativna. Srednja vrednost operatora $\hat{\rho}$ u proizvoljnom stanju $|\psi\rangle$ glasi

$$\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle = \langle\psi|\sum_{k=1}^{K} w_k|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{K} w_k\langle\psi|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{K} w_k|\langle\psi_k|\psi\rangle|^2. \tag{6.93}$$

Pošto su $w_k \geq 0$ (prvi od uslova (6.80)), sledi $\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle \geq 0$, tj. $\hat{\rho}$ je pozitivan operator.

Trag operatora $\hat{\rho}$ izračunaćemo u proizvoljno izabranom ortonormiranom bazisu $\{\ldots, |u_i\rangle, \ldots\}$. Razvoj stanja $|\psi_k\rangle$ po tom bazisu glasi $|\psi_k\rangle = \sum_n c_i^{(k)}|u_i\rangle$, pri čemu su $c_i^{(k)} = \langle u_i|\psi_k\rangle$ i $\sum_i |c_i^{(k)}|^2 = 1$. Zahvaljujući tome i drugom od uslova (6.80), trag operatora $\hat{\rho}$ je

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} &= \sum_i \langle u_i|\hat{\rho}|u_i\rangle = \sum_i \langle u_i|\left(\sum_{k=1}^{K} w_k|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\right)|u_i\rangle = \sum_i \sum_{k=1}^{K} w_k\langle u_i|\psi_k\rangle\langle\psi_k|u_i\rangle \\ &= \sum_{k=1}^{K} w_k \sum_i |\langle u_i|\psi_k\rangle|^2 = \sum_{k=1}^{K} w_k \sum_i |c_i^{(k)}|^2 = \sum_{k=1}^{K} w_k = 1.\end{aligned} \tag{6.94}$$

Pokazaćemo da važi i obrnuto, tj. da se svaki pozitivan operator jediničnog traga može napisati u obliku sume (6.89) sa statističkim težinama za koje važe uslovi (6.80).

U teoriji Hilbertovih prostora dokazuje se sledeći stav: Svaki pozitivan ermitski operator jediničnog traga ima čisto diskretan spektar. Na osnovu toga, spektralna forma operatora $\hat{\rho}$, koji pripada ovoj klasi operatora, ima oblik

$$\hat{\rho} = \sum_n \rho_n|\phi_n\rangle\langle\phi_n|, \tag{6.95}$$

gde su $\rho_n$ i $|\phi_n\rangle$ svojstvene vrednosti i odgovarajući svojstveni vektori tog operatora. Napomenimo da neke od vrednosti $\rho_n$ mogu biti međusobno jednake, tj. spektar operatora može biti degenerisan. Koristeći ortonormiranost vektora $|\phi_n\rangle$, dobijamo

$$\begin{aligned}\langle\phi_n|\hat{\rho}|\phi_n\rangle &= \langle\phi_n|\left(\sum_{n'} \rho_{n'}|\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}|\right)|\phi_n\rangle = \sum_{n'} \rho_{n'}\langle\phi_n|\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}|\phi_n\rangle \\ &= \sum_{n'} \rho_{n'}\delta_{nn'}\delta_{n'n} = \rho_n\end{aligned} \tag{6.96}$$

i

$$\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = \sum_n \langle\phi_n|\hat{\rho}|\phi_n\rangle = \sum_n \rho_n\langle\phi_n|\phi_n\rangle = \sum_n \rho_n. \tag{6.97}$$

Pošto je $\hat{\rho}$ pozitivan operator jediničnog traga, neposredno sledi $\rho_n \geq 0$ i $\sum_n \rho_n = 1$. Prema tome, svojstvene vrednosti $\rho_n$ mogu se interpretirati kao statističke težine čistih stanja $|\phi_n\rangle$ koje formiraju mešano stanje opisano operatorom $\hat{\rho}$ u formi (6.95).

Konačno, na osnovu osobina koje smo dokazali, *operator gustine možemo formalno definisati kao pozitivan operator jediničnog traga* (potreban i dovoljan uslov).

### 6.4.4 Uopštenje postulata o stanjima na mešana stanja

Pošto smo utvrdili koja klasa operatora omogućava korektno izračunavanje verovatnoće dobijanja određenog rezultata merenja u mešanom stanju, navodimo sledeći zaključak koji možemo smatrati za *uopštenje I postulata na mešana stanja*: Svako mešano stanje može se opisati nekim operatorom gustine i obrnuto, svakom operatoru gustine odgovara neko mešano stanje.

Uočimo da je operator gustine jednoznačno određen kad je dat mešani kvantni ansambl, za razliku od vektora stanja koji je određen samo s tačnošću do faznog faktora kad je dat čist ansambl. Naime, fazni faktor svakog ket vektora koji ulazi u sastav operatora gustine potire se sa faznim faktorom odgovarajućeg bra vektora jer se radi o paru kompleksno konjugovanih brojeva.

Napomenimo, međutim, da, ako je zadat operator gustine, odgovarajući mešani kvantni ansambl *nije* jednoznačno određen. Preciznije, čista stanja koja su pomešana u odgovarajućem mešanom stanju nisu jednoznačno određena, tj. razlaganje operatora gustine (6.89) nije jednoznačno. Drugim rečima, kada je jednom statistička mešavina stanja formirana, nije moguće naknadno merenjem ustanoviti koja su čista stanja tu inicijalno pomešana.

Ovo možemo pokazati na jednostavnom primeru statističke mešavine dva ortogonalna čista stanja sa jednakim statističkim težinama. Ako su $|\psi_1\rangle$ i $|\psi_2\rangle$ vektori koji predstavljaju dva takva stanja nekog kvantnog sistema, odgovarajući operator gustine glasi $\hat{\rho} = \frac{1}{2}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{2}|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$. Neka su dalje $|\psi_1'\rangle$ i $|\psi_2'\rangle$ vektori koji predstavljaju druga dva ortogonalna stanja iz dvodimenzionog potprostora koji obrazuju prva dva vektora. Operator gustine koji opisuje statističku mešavinu druga dva čista stanja sa istim težinama glasi $\hat{\rho}' = \frac{1}{2}|\psi_1'\rangle\langle\psi_1'| + \frac{1}{2}|\psi_2'\rangle\langle\psi_2'|$. Pošto navedeni parovi vektora predstavljaju dva različita ortogonalna bazisa u pomenutom potprostoru, za njih važe relacije zatvorenosti $|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2| = \hat{I}$ i $|\psi_1'\rangle\langle\psi_1'| + |\psi_2'\rangle\langle\psi_2'| = \hat{I}$, gde je $\hat{I}$ jedinični operator u tom potprostoru. Prema tome, $\hat{\rho} = \hat{\rho}' = \hat{I}/2$. Realističan primer je mešano stanje fotona koji pripada snopu potpuno nepolarizovane svetlosti (v. odeljak 6.1.2). Takav snop se može dobiti mešanjem u istom omeru dva linearno polarizovana snopa sa pravcima polarizacije koji zaklapaju međusobni ugao od $\pi/2$. Pri tome nije bitno da li su pravci polarizacije duž x i y-ose koordinatnog sistema ili zaklapaju proizvoljni (ali isti) ugao u odnosu na njih.

Poslednja nejednoznačnost, međutim, ne stvara poteškoće jer se u kvantnoj mehanici dva stanja smatraju jednakim ako pod istim okolnostima daju potpuno iste verovatnoće, što se u slučaju mešanih stanja svodi na jednakost njihovih matrica gustine.

U narednim odeljcima pokazaćemo da operator gustine takođe omogućava izračunavanje srednje vrednosti opservabli i opis vremenske evolucije sistema u mešanom stanju.

### 6.4.5 Čisto stanje kao specijalni slučaj mešanog stanja

Ukoliko statistička mešavina stanja sadrži samo jedno čisto stanje, imamo trivijalni slučaj mešanog stanja koje je svedeno na čisto stanje. Ako je ono predstavljeno vektorom $|\psi\rangle$, odgovarajući operator gustine biće

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|. \tag{6.98}$$

Pokazaćemo da je stanje opisano operatorom gustine $\hat{\rho}$ čisto ako i samo ako je

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}. \tag{6.99}$$

Pretpostavimo da operator gustine $\hat{\rho}$ opisuje neko čisto stanje i da je, prema tome, dat izrazom (6.98). Podrazumevajući da je odgovarajući vektor stanja $|\psi\rangle$ normiran na jedinicu ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$), sledi

$$\hat{\rho}^2 = (|\psi\rangle\langle\psi|)^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{\rho}. \tag{6.100}$$

Neka je sada $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$. Koristeći spektralnu formu matrice gustine (6.95), sledi

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^2 &= \sum_n \rho_n|\phi_n\rangle\langle\phi_n| \sum_{n'} \rho_{n'}|\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}| = \sum_n \sum_{n'} \rho_n\rho_{n'}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}| \\ &= \sum_n \sum_{n'} \rho_n\rho_{n'}|\phi_n\rangle\langle\phi_{n'}|\delta_{nn'} = \sum_n \rho_n^2\,|\phi_n\rangle\langle\phi_n|,\end{aligned} \tag{6.101}$$

odnosno

$$\hat{\rho}^2 - \hat{\rho} = \sum_n (\rho_n^2 - \rho_n)\,|\phi_n\rangle\langle\phi_n|. \tag{6.102}$$

Pošto je $\hat{\rho}^2 - \hat{\rho} = 0$, desna strana poslednje jednakosti takođe mora biti jednaka nuli, a to je moguće samo ako važi $\rho_n^2 - \rho_n = 0$, odnosno $\rho_n(\rho_n - 1) = 0$, $\forall n$. Odavde sledi da svojstvene vrednosti $\rho_n$ mogu biti jednake ili nuli ili jedinici. Konačno, uslov $\sum_n \rho_n = 1$ daje da samo jedna od svojstvenih vrednosti $\rho_n$ može biti jedinica, a sve ostale su nule, pa se spektralna forma (6.95) svodi na izraz (6.98), što znači da je stanje čisto.

Zamenjujući operator gustine $\hat{\rho}$ u izrazima za verovatnoće (6.88), (6.90), (6.91) i (6.92) izrazom (6.98), lako se pokazuje da se oni respektivno svode na izraze (6.58), (6.60), (6.61) i (6.62) koji važe u slučaju čistog stanja.

### 6.4.6 Srednja vrednost opservable u mešanom stanju

Srednju vrednost opservable $\hat{A}$ sa čisto diskretnim spektrom $\{a_n\}$ u mešanom stanju opisanom operatorom gustine $\hat{\rho}$ odredićemo koristeći izraze (6.88) za $\mathcal{P}(a_n)$ i (6.48) za spektralnu formu opservable $\hat{A}$. Imamo

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\rangle &= \sum_n a_n\mathcal{P}(a_n) = \sum_n a_n \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{P}_n) = \sum_n a_n \sum_i \langle u_i|\hat{\rho}\hat{P}_n|u_i\rangle \\ &= \sum_i \langle u_i|\hat{\rho}\left(\sum_n a_n\hat{P}_n\right)|u_i\rangle = \sum_i \langle u_i|\hat{\rho}\hat{A}|u_i\rangle,\end{aligned} \tag{6.103}$$

odnosno

$$\langle\hat{A}\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}). \tag{6.104}$$

Koristeći izraze (6.50) i (6.51) za spektralnu formu opservable sa neprekidnim, odnosno mešovitim spektrom, pokazuje se da formula za srednju vrednost (6.104) važi u opštem slučaju.

Konačno, u specijalnom slučaju čistog stanja operator gustine ima oblik (6.98), pa se formula za srednju vrednost (6.104) svodi na

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\rangle &= \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \mathrm{Tr}(|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}) = \sum_i\langle u_i|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}|u_i\rangle = \sum_i\langle\psi|\hat{A}|u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\hat{A}\left(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\right)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{I}\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle,\end{aligned} \tag{6.105}$$

tj. na standardnu formulu (6.64).

### 6.4.7 Vremenska evolucija mešanog stanja

Pošto je mešano stanje određeno operatorom gustine i to važi u svakom trenutku vremena, vremenska evolucija sistema u mešanom stanju određena je promenom operatora gustine u toku vremena.

Jednačina koja određuje promenu operatora gustine u toku vremena može se izvesti koristeći razlaganje tog operatora po čistim stanjima, a zatim koristeći Šredingerovu jednačinu da bi se opisala evolucija tih stanja.

Koristeći razlaganje (6.89), izvod operatora gustine po vremenu glasi

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\rho}(t) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_k w_k|\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)| \\ &= \sum_k w_k\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi_k(t)\rangle\right)\langle\psi_k(t)| + \sum_k w_k|\psi_k(t)\rangle\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi_k(t)|\right).\end{aligned} \tag{6.106}$$

Pošto je evolucija čistih stanja $|\psi_k(t)\rangle$ određena Šredingerovom jednačinom (za ket vektore)

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi_k(t)\rangle = \hat{H}|\psi_k(t)\rangle, \tag{6.107}$$

odnosno odgovarajućom konjugovanom jednačinom (za bra vektore)

$$-i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \psi_k(t)| = \langle \psi_k(t)|\hat{H}, \tag{6.108}$$

dalje imamo

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\rho}(t) &= \frac{1}{i\hbar}\sum_k w_k \hat{H}|\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)| - \frac{1}{i\hbar}\sum_k w_k|\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)|\hat{H} \\ &= \frac{1}{i\hbar}\left(\hat{H}\hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t)\hat{H}\right) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H},\hat{\rho}(t)], \end{aligned} \tag{6.109}$$

odnosno

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\rho}(t) = [\hat{H},\hat{\rho}(t)]. \tag{6.110}$$

Dobijena jednačina određuje promenu operatora gustine sa vremenom i naziva se *Fon Nojmanova jednačina* (John von Neumann).

Navedimo da održanje norme vektora čistih stanja $|\psi_k(t)\rangle$ u toku vremena (relacija (6.76) ima za posledicu održanje traga operatora

$$\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}(t) = 1. \tag{6.111}$$

### 6.4.8 Princip korespondencije. Fon Nojmanova entropija

Princip korespondencije između klasične i kvantne mehanike, koji je od fundamentalnog značaja za proceduru kvantizacije (v. odeljak 6.3.6), od značaja je i u kvantnoj statistici. U klasičnoj fizici stanje fizičkog sistema predstavljeno je tačkom u faznom prostoru, dok se statistička mešavina stanja predstavlja njihovom gustinom $\rho_{\mathrm{kl}}$ u istom prostoru. Ta gustina je realna pozitivna veličina čiji je integral po celom faznom prostoru jednak jedinici. Ovde odmah možemo uočiti korespondenciju između gustine faznih tačaka $\rho_{\mathrm{kl}}$ i operatora gustine $\hat{\rho}$ (ermitski pozitivan operator jediničnog traga), kojima se opisuju mešana stanja u klasičnoj i kvantnoj mehanici. Vidimo da pomenuta korespondencija, osim zamene $\rho_{\mathrm{kl}} \to \hat{\rho}$, uključuje i *prelazak sa integracije po faznom prostoru na računanje traga*. Tako npr. srednja vrednost fizičke veličine $A$, koja bi se u klasičnoj fizici računala kao integral $\iint \rho_{\mathrm{kl}} A\,\mathrm{d}q\mathrm{d}p$, u kvantnoj mehanici određena je formulom (6.104).

U statističkoj fizici entropija predstavlja meru nepotpunog poznavanja sistema. Gibsova entopija (Josiah Willard Gibbs) definisana je za sisteme u termodinamičkoj ravnoteži sa toplotnim rezervoarom i data je izrazom $S = -k_{\mathrm{B}}\langle \ln \rho_{\mathrm{kl}}\rangle$, gde je $k_{\mathrm{B}}$ Bolcmanova konstanta (Ludwig Boltzmann). Prelazeći na kvantnomehanički opis dobijamo izraz

$$S = -k_{\mathrm{B}}\langle \ln \hat{\rho}\rangle = -k_{\mathrm{B}}\,\mathrm{Tr}\,(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}), \tag{6.112}$$

poznat kao *Fon Nojmanova entropija*. Ako operator gustine $\hat{\rho}$ izrazimo u spektralnoj formi i trag izračunamo u njenom svojstvenom bazisu, izraz za entropiju postaje

$$S = -k_{\mathrm{B}} \sum_n \rho_n \ln \rho_n. \tag{6.113}$$

U slučaju čistog stanja, kao što smo videli, sve svojstvene vrednosti $\rho_n$ jednake su nuli, osim jedne koja je jednaka jedinici. Očigledno, tada su svi sabirci $\rho_n \ln \rho_n = 0$, odakle sledi da je za čisto stanje $S = 0$.

Konačno, razmotrimo kanonski ansambl koji je definisan kao statistički ansambl koji uključuje moguća stanja sistema u termodinamičkoj ravnoteži sa toplotnim rezervoarom. Gustina verovatnoće da se sistem koji pripada kanonskom ansamblu nađe u stanju sa energijom $E$ glasi $\rho_{\mathrm{kl}} = e^{-E/k_{\mathrm{B}}T}/Z$, gde je $T$ temperatura rezervoara, a $Z = \int\int e^{-E(q,p)/k_{\mathrm{B}}T}\,\mathrm{d}q\,\mathrm{d}p$ konstanta normiranja, poznata kao particiona funkcija. Prema tome, operator gustine u slučaju kanonskog ansambla glasi

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\hat{H}/k_{\mathrm{B}}T}, \tag{6.114}$$

gde je

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\hat{H}/k_{\mathrm{B}}T}\right). \tag{6.115}$$

particiona funkcija, a $\hat{H}$ hamiltonijan sistema.

# 7 Prostor stanja jedne čestice i višečestičnih sistema. Poseban primer: Linearni harmonijski oscilator

Kao što nam je poznato iz dosadašnjeg proučavanja kvantne mehanike, prostor stanja kvantnog sistema po svojoj strukturi uvek je neki Hilbertov prostor. U prethodnoj glavi videli smo da, osim funkcionalnog Hilbertovog prostora, koji predstavlja prostor stanja u talasnoj mehanici, prostor stanja može biti i apstraktni Hilbertov prostor, te je u okviru iste glave predstavljen odgovarajući formalizam. Međutim, ukoliko nam je cilj da proučimo neki konkretan kvantni sistem, potrebno je odrediti njegov specifičan prostor stanja. Za prostor stanja kvantnog sistema možemo reći da je određen ako znamo kako da odredimo vektor bilo kog stanja tog sistema. Pošto se svaki vektor iz prostora stanja može jednoznačno predstaviti u obliku linerne kombinacije vektora nekog bazisa u tom prostoru, sledi da je za određivanje prostora stanja dovoljno da odredimo neki njegov bazis. Pogodno je da izabrani bazis bude ortonormiran, pa se po pravilu bira svojstveni bazis neke kompletne opservable ili, alternativno, kompletan skup kompatibilnih opservabli.

Prvi primer koji je od suštinskog značaja sam po sebi, ali i za proučavanje složenijih sistema, jeste prostor stanja jedne čestice. Pogodan bazis u tom slučaju je svojstveni bazis operatora koordinate. Poći ćemo od jednostavnog slučaja fiktivne čestice čije je kretanje ograničeno na jedan stepen slobode, a zatim razmotriti česticu (bez spina) u tri dimenzije. Kada je tzv. orbitni prostor stanja čestice određen, prostor stanja višečestičnog sistema može se konstruisati kao direktni proizvod jednočestičnih prostora. Poseban, ali takođe veoma značajan primer je linearni harmonijski oscilator. U ovom slučaju pogodan bazis je skup svojstvenih vektora hamiltonijana oscilatora. Svojstveni problem ovog operatora već smo rešavali koristeći formalizam talasne mehanike (prva knjiga). Ovde ćemo svojstveni problem rešiti koristeći algebarski prilaz koji se zasniva na kanonskoj kvantizaciji i formalizmu operatora anihilacije i kreacije. Proučićemo, takođe, još jedan važan skup stanja linearnog harmonijskog oscilatora – njegova koherentna stanja. Konačno, razrađeni formalizam ćemo uopštiti u cilju primene na opis sistema identičnih čestica, poznat kao formalizam druge kvantizacije, i uvesti odgovarajući (Fokov) prostor stanja.

Formalizam i rezultati koji će biti predstavljeni u ovoj glavi direktno će biti primenjeni u sledećoj glavi, koja je posvećena teoriji reprezentovanja.

# 7.1 Određivanje prostora stanja preko svojstvenih stanja koordinate

## 7.1.1 Prostor stanja čestice u jednoj dimenziji

Da bismo definisali prostor stanja realne čestice, a zatim i proizvoljnog višečestičnog sistema, razmotrićemo prvo fiktivnu česticu čije je kretanje ograničeno na jedan stepen slobode duž x-ose. Prostor stanja $\mathcal{H}_x$ te čestice odredićemo nalaženjem svojstvenog bazisa neke kompletne opservable koja u njemu deluje. Osnovne dinamičke promenljive čestice u ovom slučaju su koordinata $x$ i impuls $p_x$, kojima, na osnovu VI postulata, pridružujemo opservable $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$ koje zadovoljavaju komutacionu relaciju $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$. Pošto je u pitanju sistem sa jednim stepenom slobode, obe opservable su kompletne u $\mathcal{H}_x$. Izabraćemo opservablu $\hat{x}$ i proučićemo njen svojstveni problem.

Pretpostavimo da $\hat{x}$ ima bar jednu svojstvenu vrednost $x_0$ [1], dakle

$$\hat{x}|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle, \tag{7.1}$$

gde je $|x_0\rangle$ odgovarajući svojstveni vektor iz $\mathcal{H}_x$, ukoliko $x_0$ pripada diskretnom delu spektra, odnosno iz opremljenog prostora od $\mathcal{H}_x$, ako $x_0$ pripada neprekidnom delu spektra. Da bismo odredili ostatak spektra, uvešćemo tzv. operator translacije

$$\hat{U}(a) = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}_x}, \tag{7.2}$$

gde je $a$ realni parametar koji ima dimenziju dužine, i posmatraćemo komutator $[\hat{x}, \hat{U}(a)]$. Koristeći razvoj[2] $e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}_x} = \sum_{n=0}^{\infty}(-ia/\hbar)^n \hat{p}_x^n/n!$ i relaciju $[\hat{x}, \hat{p}_x^n] = i\hbar n\hat{p}_x^{n-1}$, koja se lako dokazuje indukcijom polazeći od komutacione relacije $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$, sledi

$$\begin{aligned}
[\hat{x}, \hat{U}(a)] &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}a\right)^n [\hat{x}, \hat{p}_x^n] = i\hbar \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}a\right)^n n\hat{p}_x^{n-1} \\
&= a\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!}\left(-\frac{i}{\hbar}a\right)^{n-1} \hat{p}_x^{n-1} = a\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}a\right)^n \hat{p}_x^n = a\hat{U}(a),
\end{aligned} \tag{7.3}$$

odnosno

$$\hat{x}\hat{U}(a) = \hat{U}(a)(\hat{x} + a). \tag{7.4}$$

Primenjujući obe strane jednakosti (7.4) na svojstveni vektor $|x_0\rangle$ i koristeći jednačinu (7.1), sledi

$$\hat{x}\hat{U}(a)|x_0\rangle = (x_0 + a)\hat{U}(a)|x_0\rangle. \tag{7.5}$$

Poslednja jednačina može se posmatrati kao svojstvena jednačina opservable $\hat{x}$, gde je $\hat{U}(a)|x_0\rangle$ svojstveni vektor koji odgovara svojstvenoj vrednosti $x_0 + a$, odnosno

$$\hat{U}(a)|x_0\rangle = |x_0 + a\rangle. \tag{7.6}$$

[1] U suprotnom, operator $\hat{x}$ ne bi mogao biti opservabla (v. odeljke 2.2.5 i 3.3.2).

[2] Podsetimo se da operatorski izraz $f(\hat{A})$ predstavlja razvoj analitičke funkcije $f(A)$ u stepeni red po promenljivoj $A$, u kome je potom ta promenljiva zamenjena odgovarajućim operatorom $\hat{A}$ (v. odeljak 3.3.4).

Pošto parametar $a$ može uzeti bilo koju vrednost iz skupa realnih brojeva, sledi da opservabla $\hat{x}$ ima neprekidan skup svojstvenih vrednosti $x = x_0 + a \in (-\infty, +\infty)$ i svojstvenih vektora $|x\rangle = |x_0 + a\rangle$, tj.

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad x \in (-\infty, +\infty). \tag{7.7}$$

Drugim rečima, neprekidni spektar od $\hat{x}$ je cela realna osa, a skup vektora

$$|x\rangle = \hat{U}(x)|0\rangle \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}x\hat{p}_x}|0\rangle, \quad x \in (-\infty, +\infty), \tag{7.8}$$

gde smo izabrali da je $x_0 = 0$, predstavlja svojstveni bazis opservable $\hat{x}$ u $\mathcal{H}_x$. Pri tome, svojstveni vektori $|x\rangle$, s obzirom na to da odgovaraju neprekidnim svojstvenim vrednostima, nemaju konačnu normu, dakle spadaju u uopštene vektore koji pripadaju opremljenom prostoru od $\mathcal{H}_x$. Kao uopšteni svojstveni vektori opservable, oni su međusobno ortogonalni i mogu se normirati na delta funkciju (v. odeljak 2.2.6), dakle

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x'). \tag{7.9}$$

Konačno, navedimo da je spektar opservable $\hat{x}$, s obzirom na to da je ona kompletna, *nedegenerisan* (v. odeljak 3.4.11). Odatle sledi da $\hat{x}$ nema drugih svojstvenih vektora osim uopštenih vektora (7.8) i, prema tome, nema diskretnih svojstvenih vrednosti, tj. njen spektar je *čisto neprekidan*. Tada relacija zatvorenosti (v. odeljak 6.2.6) skupa vektora (7.8) glasi

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\mathrm{d}x = \hat{I}. \tag{7.10}$$

Na osnovu toga, prostor $\mathcal{H}_x$ čine vektori

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|\psi\rangle|x\rangle\mathrm{d}x, \tag{7.11}$$

takvi da je $\int_{-\infty}^{+\infty} |\langle x|\psi\rangle|^2\mathrm{d}x < +\infty$, dok sve ostale linearne kombinacije uopštenih vektora $|x\rangle$ čine opremljeni prostor od $\mathcal{H}_x$.

### 7.1.2 Delovanje operatora $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$ u prostoru $\mathcal{H}_x$

Delovanje operatora $\hat{x}$ na vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_x$ zadaje se uz pomoć razvoja (7.11)

$$\hat{x}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|\psi\rangle\hat{x}|x\rangle\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} x\langle x|\psi\rangle|x\rangle\mathrm{d}x. \tag{7.12}$$

Rezultujući vektor $\hat{x}|\psi\rangle$ pripadaće prostoru $\mathcal{H}_x$ ako je $\int_{-\infty}^{+\infty} |\langle x|\psi\rangle|^2 x^2\mathrm{d}x < +\infty$.

S druge strane, koristeći razvoj $e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}_x} \approx 1 - ia\hat{p}_x/\hbar + \cdots$, za male vrednosti parametra $a$ imamo $\hat{U}(a)|\psi\rangle \approx (1 - ia\hat{p}_x/\hbar)|\psi\rangle$, odakle je

$$\hat{p}_x|\psi\rangle \approx -\frac{i\hbar}{a}\left[1 - \hat{U}(a)\right]|\psi\rangle. \tag{7.13}$$

Koristeći ponovo razvoj (7.11), sledi

$$
\begin{aligned}
\hat{p}_x|\psi\rangle &\approx -\frac{i\hbar}{a}\left[1-\hat{U}(a)\right]\int_{-\infty}^{+\infty}\langle x|\psi\rangle|x\rangle\,\mathrm{d}x \\
&= -\frac{i\hbar}{a}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle x|\psi\rangle|x\rangle\,\mathrm{d}x - \frac{i\hbar}{a}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle x|\psi\rangle|x+a\rangle\,\mathrm{d}x \\
&= -\frac{i\hbar}{a}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle x|\psi\rangle|x\rangle\,\mathrm{d}x - \frac{i\hbar}{a}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle x-a|\psi\rangle|x\rangle\,\mathrm{d}x \\
&= -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\langle x|\psi\rangle-\langle x-a|\psi\rangle}{a}|x\rangle\,\mathrm{d}x.
\end{aligned}
\tag{7.14}
$$

U graničnom slučaju kada $a \to 0$ približna jednakost prelazi u jednakost, a količnik $(\langle x|\psi\rangle - \langle x-a|\psi\rangle)/a$ prelazi u izvod $\mathrm{d}\langle x|\psi\rangle/\mathrm{d}x$, što daje

$$
\hat{p}_x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\langle x|\psi\rangle\right)|x\rangle\,\mathrm{d}x. \tag{7.15}
$$

Vektor $\hat{p}_x|\psi\rangle$ pripadaće prostoru $\mathcal{H}_x$ ako je $\int_{-\infty}^{+\infty}|-i\hbar(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)\langle x|\psi\rangle|^2\mathrm{d}x < +\infty$.

### 7.1.3 Orbitni prostor stanja čestice

Osnovne dinamičke promenljive realne čestice su tri komponente njenog vektora položaja **r** i tri komponente vektora impulsa **p**. To su npr. koordinate $x, y, z$ i njima konjugovani impulsi $p_x$, $p_y$, $p_z$. Na osnovu VI postulata, ovim varijablama pridružujemo opservable $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$ i $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$, koje zadovoljavaju komutacione relacije: $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0$, $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$, $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ $(i, j = x, y, z)$, i koje pišemo kao *vektorske operatore* $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ i $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$. Komponente $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$ zbog komutiranja čine kompletan skup kompatibilnih opservabli u tzv. *orbitnom prostoru stanja čestice* $\mathcal{H}_o$ [3]. Isto važi i za komponente $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$.

Operatori $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$ su pojedinačno kompletne opservable u prostoru $\mathcal{H}_x$, a analogno važi za $\hat{y}$ i $\hat{p}_y$ u $\mathcal{H}_y$ i za $\hat{z}$ i $\hat{p}_z$ u $\mathcal{H}_z$. Prostor $\mathcal{H}_o$ tada možemo predstaviti u obliku direktnog proizvoda prostora

$$
\mathcal{H}_o = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z, \tag{7.16}
$$

što znači da se uređene trojke elemenata $|\psi_x\rangle$, $|\psi_y\rangle$, $|\psi_z\rangle$ iz odgovarajućih faktor-prostora jednoznačno preslikavaju u elemente iz $\mathcal{H}_o$, koje pišemo kao $|\psi_x\rangle\otimes|\psi_y\rangle\otimes|\psi_z\rangle$ ili $|\psi_x\rangle|\psi_y\rangle|\psi_z\rangle$ i koji preko njihovih linearnih kombinacija obrazuju ceo prostor $\mathcal{H}_o$.

[3] Stanja koja čine orbitni prostor opisuju dinamiku čestice u prostoru i vremenu, ne uzimajući u obzir unutrašnje stepene slobode čestice kao što je spin. U narednim glavama videćemo da spinska stanja čine zaseban vektorski prostor, a ukupan prostor stanja čestice onda je direktni proizvod njenog orbitnog i spinskog prostora.

Ako sa $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ označimo svojstvene vektore opservabli $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$, koji odgovaraju svojstvenim vrednostima $x, y, z \in (-\infty, +\infty)$, onda te tri opservable, s obzirom na to da su kompatibilne, imaju zajedničke svojstvene vektore $|\mathbf{r}\rangle = |x\rangle|y\rangle|z\rangle$. Njihov zajednički svojstveni problem, $\hat{x}|\mathbf{r}\rangle = x|\mathbf{r}\rangle$, $\hat{y}|\mathbf{r}\rangle = y|\mathbf{r}\rangle$, $\hat{z}|\mathbf{r}\rangle = z|\mathbf{r}\rangle$, obično pišemo u obliku

$$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle, \tag{7.17}$$

a skup vektora $\{|\mathbf{r}\rangle, \forall \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3\}$ predstavlja svojstveni bazis vektorskog operatora $\hat{\mathbf{r}}$ u $\mathcal{H}_o$. Uopštavajući izraz (7.8), ovi vektori se mogu predstaviti u obliku

$$|\mathbf{r}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}}|\mathbf{r}=\mathbf{0}\rangle. \tag{7.18}$$

Prema tome, spektar operatora $\hat{\mathbf{r}}$ je *neprekidan* (čine ga svi vektori položaja $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$) i *nedegenerisan* (zbog kompletnosti skupa opservabli $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$). Relacije ortonormiranosti i zatvorenosti u ovom slučaju glase

$$\langle\mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{7.19}$$

odnosno

$$\int |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| \mathrm{d}^3\mathbf{r} = \hat{I}, \tag{7.20}$$

a elementi orbitnog prostora stanja čestice $\mathcal{H}_o$ su vektori

$$|\psi\rangle = \int \langle\mathbf{r}|\psi\rangle|\mathbf{r}\rangle \mathrm{d}^3\mathbf{r}, \tag{7.21}$$

za koje važi uslov *kvadratne integrabilnosti* $\int |\langle\mathbf{r}|\psi\rangle|^2 \mathrm{d}^3\mathbf{r} < +\infty$.

### 7.1.4 Delovanje operatora $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$ u prostoru $\mathcal{H}_o$

Delovanje operatora $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$ na vektore iz $\mathcal{H}_o$ može se odrediti uopštavajući izraze za jednodimenzioni slučaj. Uopštavanjem izraza (7.12), delovanje operatora $\hat{x}$ na proizvoljni vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_o$ glasi

$$\hat{x}|\psi\rangle = \int x\langle\mathbf{r}|\psi\rangle|\mathbf{r}\rangle \mathrm{d}^3\mathbf{r}. \tag{7.22}$$

Koristeći analogne izraze za y i z-komponentu, zajednički izraz za sve tri komponente pišemo u obliku

$$\hat{\mathbf{r}}|\psi\rangle = \int \mathbf{r}\langle\mathbf{r}|\psi\rangle|\mathbf{r}\rangle \mathrm{d}^3\mathbf{r}, \tag{7.23}$$

što takođe neposredno sledi delujući operatorom $\hat{\mathbf{r}}$ na razvoj (7.21). Pri tome, rezultujući vektor pripada prostoru $\mathcal{H}_o$ ako je $\int|\langle\mathbf{r}|\psi\rangle|^2\mathbf{r}^2 \mathrm{d}^3\mathbf{r} < +\infty$.

Što se tiče delovanja operatora impulsa, prvo uopštavamo izraz (7.15) na

$$\hat{p}_x|\psi\rangle = \int \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\langle \mathbf{r}|\psi\rangle\right)|\mathbf{r}\rangle\, \mathrm{d}^3\mathbf{r}, \tag{7.24}$$

a zatim, koristeći analogne izraze za y i z-komponentu, zapisujemo zajednički izraz za sve tri komponente u obliku

$$\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = \int (-i\hbar\nabla\langle \mathbf{r}|\psi\rangle)|\mathbf{r}\rangle \mathrm{d}^3\mathbf{r}. \tag{7.25}$$

Rezultujući vektor pripada prostoru $\mathcal{H}_o$ ako je $\int |-i\hbar\nabla\langle \mathbf{r}|\psi\rangle|^2\, \mathrm{d}^3\mathbf{r} < +\infty$, tj. ako je Furijeov koeficijent $\langle \mathbf{r}|\psi\rangle$ diferencijabilna funkcija u $\mathbb{R}^3$.

### 7.1.5 Prostor stanja višečestičnog sistema

Osnovne dinamičke promenljive sistema koji se sastoji od $N$ čestica su komponente vektora položaja $\mathbf{r}_i$ i vektora impulsa $\mathbf{p}_i$, $i = 1, \ldots, N$ (ukupno $6N$ promenljivih). Ovim vektorima se, analogno kao u slučaju jedne čestice, pridružuju vektorski operatori $\hat{\mathbf{r}}_i$ i $\hat{\mathbf{p}}_i$, čije komponente, u skladu sa VI postulatom, zadovoljavaju komutacione relacije (6.74). Kao posledica toga skup od $3N$ operatora koordinata $\hat{x}_i$, $\hat{y}_i$, $\hat{z}_i$ predstavlja kompletan skup kompatibilnih opservabli u *orbitnom prostoru stanja sistema* $\mathcal{H}^{(o)}_{1\ldots N}$. Isto važi i za skup od $3N$ operatora komponenata impulsa.

Pošto tri komponente vektorskog operatora $\hat{\mathbf{r}}_i$ (i, alternativno, tri komponente vektorskog operatora $\hat{\mathbf{p}}_i$) čine kompletan skup kompatibilnih opservabli u orbitnom prostoru stanja $i$-te čestice $\mathcal{H}^{(o)}_i$, orbitni prostor stanja celog sistema može se predstaviti u obliku direktnog proizvoda orbitnih prostora stanja pojedinačnih čestica

$$\mathcal{H}^{(o)}_{1\ldots N} = \mathcal{H}^{(o)}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}^{(o)}_N. \tag{7.26}$$

Kao posledica ove dekompozicije, skup opservabli $\hat{\mathbf{r}}_1, \ldots, \hat{\mathbf{r}}_N$ ima zajedničke svojstvene vektore $|\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N\rangle$, koji se mogu napisati u obliku direktnog proizvoda svojstvenih vektora $|\mathbf{r}_i\rangle$ tih opservabli, tj.

$$|\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N\rangle = |\mathbf{r}_1\rangle \cdots |\mathbf{r}_N\rangle. \tag{7.27}$$

Ovi vektori za sve moguće vrednosti koordinata sistema (tj. $\forall \mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N \in \mathbb{R}^3$) predstavljaju zajednički svojstveni bazis skupa opservabli $\hat{\mathbf{r}}_1, \ldots, \hat{\mathbf{r}}_N$ u prostoru $\mathcal{H}^{(o)}_{1\ldots N}$, a sam prostor čine vektori

$$|\psi\rangle = \int \cdots \int \langle \mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N|\psi\rangle|\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N\rangle\, \mathrm{d}^3\mathbf{r}_1 \cdots \mathrm{d}^3\mathbf{r}_N \tag{7.28}$$

za koje važi $\int \cdots \int |\langle \mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N|\psi\rangle|^2 \mathrm{d}^3\mathbf{r}_1 \cdots \mathrm{d}^3\mathbf{r}_N < +\infty$.

Ovde treba napomenuti da prostor stanja sistema identičnih čestica nije ceo prostor (7.26), već njegov potprostor koji čine vektori stanja određene simetrije u odnosu na izmenu čestica. O ovome će biti reči u glavi 12.

## 7.2 Linearni harmonijski oscilator i koherentna stanja. Fokov prostor

### 7.2.1 Rešavanje svojstvenog problema hamiltonijana oscilatora u formalizmu operatora anihilacije i kreacije

Svojstveni problem hamiltonijana linearnog harmonijskog oscilatora, čija su rešenja (svojstvene energije i svojstvene funkcije) određena analitičkim putem u prvom delu ovog kursa (v. odeljak 4.3.6), ovde će biti rešen koristeći algebarski prilaz. Polazna tačka u tome je komutaciona relacija između operatora koordinate i impulsa

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \tag{7.29}$$

koja, prema VI postulatu, predstavlja kvantni uslov za ovaj sistem.

Hamiltonijan linearnog harmonijskog oscilatora glasi

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2, \tag{7.30}$$

gde je $m$ masa čestice, a $\omega$ frekvencija oscilatora. Da bismo algebarskim putem rešili njegov svojstveni problem, hamiltonijan ćemo predstaviti kao funkciju operatora

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i\hat{p}_x}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \tag{7.31}$$

$$\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i\hat{p}_x}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \tag{7.32}$$

koji su jedan drugom adjungovani i, prema tome, nisu ermitski. Proizvodi ova dva operatora, zahvaljujući relaciji (7.29), glase

$$\hat{a}^+\hat{a} = \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}_x^2}{2m\hbar\omega} + \frac{i}{2\hbar}(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}) = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}, \tag{7.33}$$

$$\hat{a}\hat{a}^+ = \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}_x^2}{2m\hbar\omega} - \frac{i}{2\hbar}(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}) = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}. \tag{7.34}$$

Krajnji član na desnim stranama ovih jednakosti ($\mp 1/2$) javlja se zbog nekomutiranja opservabli $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$ (relacija (7.29)), a zbog razlike u znaku tog člana u prvoj i drugoj jednakosti sledi da ni operatori $\hat{a}$ i $\hat{a}^+$ ne komutiraju. Imamo $\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1$, tj.

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1, \tag{7.35}$$

i ova relacija ekvivalentna je relaciji (7.29).

Polazeći od jednakosti (7.33), hamiltonijan linearnog harmonijskog oscilatora može se napisati u obliku

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \tfrac{1}{2}\right). \tag{7.36}$$

Ako uvedemo operator

$$\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}, \tag{7.37}$$

koji je, za razliku od operatora $\hat{a}$ i $\hat{a}^+$, ermitski (naime, $(\hat{a}^+\hat{a})^+ = \hat{a}^+(\hat{a}^+)^+ = \hat{a}^+\hat{a}$), imamo

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \tfrac{1}{2}\right). \tag{7.38}$$

Na osnovu ovog izraza jasno je da operator $\hat{N}$ i hamiltonijan imaju zajedničke svojstvene vektore. Prema tome, rešavanjem svojstvenog problema

$$\hat{N}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle, \tag{7.39}$$

nalazimo i rešenja svojstvenog problema hamiltonijana. Pošto se radi o sistemu sa jednim stepenom slobode, pretpostavljamo da je hamiltonijan, a time i operator $\hat{N}$, kompletna opservabla (v. odeljak 3.4.11). To znači da su svojstvene vrednosti $\nu$ operatora $\hat{N}$ nedegenerisane i da odgovarajuće svojstvene vektore (određene do na konstantni faktor) možemo označiti sa $|\nu\rangle$. S obzirom na to da je potencijal $\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ vezujući na celom domenu $x \in (-\infty, \infty)$, sva stanja linearnog harmonijskog oscilatora su vezana. Iz tog razloga vektori koji opisuju ta stanja imaju konačnu normu, a energijski spektar oscilatora, odnosno spektar operatora $\hat{N}$, je čisto diskretan, što će biti potvrđeno u daljoj analizi. U nastavku ćemo podrazumevati da su svojstveni vektori $|\nu\rangle$ normirani na jedinicu, tj. da je $\langle\nu|\nu\rangle = 1$.

Pre nego što krenemo sa određivanjem svojstvenih vrednosti i svojstvenih vektora operatora $\hat{N}$, uočimo da su sve njegove svojstvene vrednosti nenegativne. Naime, pošto je $\|\hat{a}|\nu\rangle\|^2 \geq 0$ (znak jednakosti važi ukoliko je $\hat{a}|\nu\rangle$ nulti vektor), iz jednakosti

$$\|\hat{a}|\nu\rangle\|^2 = \langle\nu|\hat{a}^+\hat{a}|\nu\rangle = \langle\nu|\hat{N}|\nu\rangle = \nu\langle\nu|\nu\rangle = \nu \tag{7.40}$$

sledi $\nu \geq 0$. Ova osobina obezbeđuje postojanje donje granice za $\nu$, a time i postojanje osnovnog stanja oscilatora. Koristeći komutacionu relaciju (7.35), takođe imamo

$$\|\hat{a}^+|\nu\rangle\|^2 = \langle\nu|\hat{a}\hat{a}^+|\nu\rangle = \langle\nu|\hat{a}^+\hat{a}+1|\nu\rangle = \langle\nu|\hat{N}+1|\nu\rangle = \nu+1. \tag{7.41}$$

Svojstvene vrednosti i svojstvene vektore operatora $\hat{N}$ odredićemo polazeći od komutacione relacije (7.35). Zahvaljujući toj relaciji imamo $[\hat{N},\hat{a}] = [\hat{a}^+\hat{a},\hat{a}] = \hat{a}^+[\hat{a},\hat{a}] + [\hat{a}^+,\hat{a}]\hat{a} = -[\hat{a},\hat{a}^+]\hat{a} = -\hat{a}$ i, takođe, $[\hat{N},\hat{a}^+] = [\hat{a}^+\hat{a},\hat{a}^+] = \hat{a}^+[\hat{a},\hat{a}^+] + [\hat{a}^+,\hat{a}^+]\hat{a} = \hat{a}^+$, dakle

$$[\hat{N},\hat{a}] = -\hat{a}, \tag{7.42}$$

$$[\hat{N},\hat{a}^+] = \hat{a}^+. \tag{7.43}$$

Pretpostavimo sada da operator $\hat{N}$ ima bar jednu svojstvenu vrednost koju ćemo obeležiti sa $\nu$, a odgovarajući normirani svojstveni vektor sa $|\nu\rangle$. Ako komutacione relacije (7.42) i (7.43) napišemo u obliku $\hat{N}\hat{a} = \hat{a}(\hat{N}-1)$, odnosno $\hat{N}\hat{a}^+ = \hat{a}^+(\hat{N}+1)$, a zatim obema stranama ovih jednakosti delujemo na vektor $|\nu\rangle$, dobija se

$$\hat{N}\hat{a}|\nu\rangle = (\nu-1)\hat{a}|\nu\rangle, \tag{7.44}$$

$$\hat{N}\hat{a}^{+}|\nu\rangle = (\nu+1)\hat{a}^{+}|\nu\rangle. \tag{7.45}$$

Ove jednačine imaju oblik svojstvenog problema operatora $\hat{N}$ gde su $\hat{a}\,|\nu\rangle$ i $\hat{a}^{+}|\nu\rangle$ svojstveni vektori tog operatora, a $\nu-1$ i $\nu+1$ odgovarajuće svojstvene vrednosti. Dakle, ako je $\nu$ svojstvena vrednost operatora $\hat{N}$, onda su to i $\nu \pm 1$. Međutim, za razliku od vektora $|\nu\rangle$, vektori $\hat{a}|\nu\rangle$ i $\hat{a}^{+}|\nu\rangle$ nisu jedinični, već njihova norma, na osnovu relacija (7.40) i (7.41), iznosi $\sqrt{\nu}$, odnosno $\sqrt{\nu+1}$. Prema tome, možemo pisati

$$\hat{a}\,|\nu\rangle = \sqrt{\nu}\,|\nu-1\rangle, \tag{7.46}$$

$$\hat{a}^{+}|\nu\rangle = \sqrt{\nu+1}\,|\nu+1\rangle, \tag{7.47}$$

gde su $|\nu\pm1\rangle$ svojstveni vektori jedinične norme pridruženi svojstvenim vrednostima $\nu\pm1$. Ove relacije u suštini opisuju delovanje operatora $\hat{a}$ i $\hat{a}^{+}$ na svojstvene vektore operatora $\hat{N}$. Rezultat delovanja su svojstveni vektori koji odgovaraju svojstvenim vrednostima umanjenim, odnosno uvećanim za jedan u odnosu na svojstvenu vrednost pridruženu početnom vektoru. Navedena interpretacija, međutim, ne važi za delovanje operatora $\hat{a}$ na vektor $|\nu\rangle$ ako je $\nu = 0$. U tom slučaju relacija (7.40) daje $\|\hat{a}\,|0\rangle\|^2 = 0$, odakle sledi

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \tag{7.48}$$

tj. operator $\hat{a}$ prevodi vektor $|0\rangle$ u nulti vektor[4].

Posmatrajmo sada višestruko delovanje operatora $\hat{a}$ i $\hat{a}^{+}$ na vektor $|\nu\rangle$, koje možemo napisati u obliku $\hat{a}^{p}|\nu\rangle$, odnosno $(\hat{a}^{+})^{p}|\nu\rangle$, gde je $p$ broj uzastopnih primena odgovarajućeg operatora. Ako $\nu$ nije ceo broj, svaka pojedinačna primena ovih operatora prevešće rezultat prethodnog delovanja, koji je neki svojstveni vektor operatora $\hat{N}$, u novi svojstveni vektor sa svojstvenom vrednošću umanjenom, odnosno uvećanom za jedan, a konačni izrazi $\hat{a}^{p}|\nu\rangle$ i $(\hat{a}^{+})^{p}|\nu\rangle$ biće svojstveni vektori operatora $\hat{N}$ koji odgovaraju svojstvenim vrednostima $\nu-p$, odnosno $\nu+p$. Uočimo, međutim, da će tada svojstvene vrednosti pridružene vektorima $\hat{a}^{p}|\nu\rangle$, za koje je $p > \nu$, biti negativne, što je u suprotnosti sa uslovom nenegativnosti. Ako je pak $\nu$ ceo broj, izraz $\hat{a}^{p}|\nu\rangle$ će u slučaju $p < \nu$ biti svojstveni vektor pridružen svojstvenoj vrednosti $\nu-p$; u slučaju $p = \nu$ on će biti svojstveni vektor pridružen svojstvenoj vrednosti 0; dok za $p > \nu$ on neće biti svojstveni vektor (sa negativnom svojstvenom vrednošću), već, na osnovu relacije (7.48), nulti vektor. Prema tome, da bi uslov nenegativnosti bio zadovoljen, sve svojstvene vrednosti operatora $\hat{N}$ moraju biti *celobrojne*. Ovaj zaključak ne menja suštinski značenje izraza $(\hat{a}^{+})^{p}|\nu\rangle$. Za proizvoljno $p$ on je svojstveni vektor operatora $\hat{N}$ pridružen svojstvenoj vrednosti $\nu+p$, odakle sledi da spektar operatora $\hat{N}$ čine svi nenegativni celi brojevi, tj.

$$\nu = n = 0, 1, 2, \dots\,. \tag{7.49}$$

[4]Ovde treba strogo razlikovati svojstveni vektor $|0\rangle$ operatora $\hat{N}$ koji odgovara svojstvenoj vrednosti $\nu = 0$ od nultog vektora 0 čija je norma jednaka nuli i koji, iz tog razloga, ne predstavlja kvantno stanje.

Kao što smo na početku analize svojstvenog problema (7.39) zaključili, pošto je operator $\hat{N}$ kompletna opservabla[5], svojstvene vrednosti $n$ su nedegenerisane. To onda važi i za svojstvene energije hamiltonijana (7.38), koje, s obzirom na to da je on linearna funkcija operatora $\hat{N}$, glase

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \ldots . \tag{7.50}$$

Ovaj izraz se poklapa sa izrazom (4.139) za energijske nivoe linearnog harmonijskog oscilatora, dobijenim rešavanjem vremenski nezavisne Šredingerove jednačine u diferencijalnom obliku (v. odeljak 4.3.6), a celobrojna veličina $n$ igra ulogu kvantnog broja koji prebrojava svojstvena stanja oscilatora. Pošto su svojstvene vrednosti operatora $\hat{N}$ celobrojne i nedegenerisane, odgovarajuće svojstvene vektore, koji su istovremeno i svojstveni vektori hamiltonijana oscilatora, možemo označiti sa $|n\rangle$, a s obzirom na relacije (7.46)-(7.48), delovanje operatora $\hat{a}$ i $\hat{a}^+$ na te vektore glasi

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \ \text{ za } \ n > 0 \ \text{ i } \ \hat{a}|0\rangle = 0, \tag{7.51}$$

$$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle. \tag{7.52}$$

Koristeći ove relacije svi svojstveni vektori $|n\rangle$ mogu se izvesti polazeći od jednog od njih. Obično se polazi od svojstvenog vektora $|0\rangle$, koji je definisan uslovom (7.48), a ostali vektori se dobijaju rekurzivno uz pomoć relacije (7.52). Imamo $(\hat{a}^+)^n|0\rangle = (\hat{a}^+)^{n-1}\sqrt{1}\,|1\rangle = \cdots = \sqrt{1}\cdots\sqrt{n}\,|n\rangle \equiv \sqrt{n!}\,|n\rangle$, odakle je

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,(\hat{a}^+)^n|0\rangle. \tag{7.53}$$

Koristeći komutacione relacije (7.35), (7.42) i (7.43) lako se proverava da su ovi vektori rešenja svojstvene jednačine (7.39), dakle

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \tag{7.54}$$

i da čine ortonormirani skup vektora, tj. $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$. Pošto vrednosti $n = 0$ odgovara najniža vrednost energije oscilatora $E_0 = \hbar\omega/2$ („energija nulte tačke"), vektor $|0\rangle$ predstavlja njegovo osnovno stanje.

Operatori $\hat{a}$, $\hat{a}^+$ i $\hat{N}$ uvedeni su kao pomoćni operatori u cilju rešavanja svojstvenog problema hamiltonijana linearnog harmonijskog oscilatora. Njima se, međutim, može pripisati određeno fizičko značenje na osnovu njihovog delovanja na svojstvena stanja

[5] Kompletnost opservable $\hat{N}$ može se eksplicitno dokazati na sledeći način. Osnovne dinamičke promenljive linearnog harmonijskog oscilatora su koordinata $x$ i impuls $p_x$, kojima, na osnovu VI postulata, pridružujemo opservable $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$. Sve druge fizičke veličine definisane na ovom sistemu mogu se predstaviti kao funkcije osnovnih dinamičkih promenljivih, a njima pridružene opservable su neke funkcije opservabli $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$. Alternativno, s obzirom na relacije (7.31), (7.32), te opservable se mogu predstaviti i kao funkcije operatora $\hat{a}$ i $\hat{a}^+$. Može se pokazati da je bilo koja funkcija operatora $\hat{a}$ i $\hat{a}^+$ koja komutira sa operatorom $\hat{N}$ u stvari funkcija tog operatora. Prema tome, sve opservable koje komutiraju sa ovim operatorom su njegove funkcije i njihove svojstvene vrednosti su funkcije njegovih svojstvenih vrednosti, što znači da je $\hat{N}$ kompletna opservabla.

oscilatora. Tako delovanjem operatora $\hat{a}$ na vektor $|n\rangle$, koji predstavlja stanje oscilatora sa određenom vrednošću energije $E_n$, dobija se vektor $\sqrt{n}\,|n-1\rangle$, koji predstavlja stanje oscilatora sa energijom $E_{n-1} = E_n - \hbar\omega$, dok delovanje operatora $\hat{a}^+$ na isti početni vektor daje vektor $\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$, koji predstavlja stanje oscilatora sa energijom $E_{n+1} = E_n + \hbar\omega$ (v. relacije (7.50)-(7.52)). Dakle, operatori $\hat{a}$ i $\hat{a}^+$ prevode stanje oscilatora u novo stanje u kome on ima jedan kvant energije $\hbar\omega$ manje, odnosno kvant energije više u odnosu na početno stanje. Iz tog razloga $\hat{a}$ se naziva *operator anihilacije* (uništavanja), a $\hat{a}^+$ *operator kreacije* (stvaranja). S druge strane, operator $\hat{N}$ vektoru $|n\rangle$, koji je njegov svojstveni vektor, pridružuje svojstvenu vrednost $n$, koja predstavlja broj kvanata energije $\hbar\omega$ oscilatora u stanju opisanom ovim vektorom, odnosno kvantni broj stanja. Iz tog razloga $\hat{N}$ se naziva *operator kvantnog broja*.

### 7.2.2 Koherentna stanja oscilatora

Među različitim stanjima u kojima se linearni harmonijski oscilator može naći, poseban značaj, pored svojstvenih stanja hamiltonijana, imaju svojstvena stanja operatora anihilacije. Pokazaćemo da svojstveni problem ovog operatora

$$\hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle \tag{7.55}$$

ima rešenje za proizvoljnu kompleksnu vrednost $\alpha$. Vektor $|\alpha\rangle$, koji predstavlja to rešenje, potražićemo u obliku razvoja po svojstvenim stanjima hamiltonijana

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(\alpha)|n\rangle. \tag{7.56}$$

Zamenjujući vektor $|\alpha\rangle$ na obema stranama jednačine (7.55) ovim razvojem i primenjujući relaciju (7.51) dobijamo $\sum_{n=1}^{\infty} c_n(\alpha)\sqrt{n}\,|n-1\rangle = \alpha\sum_{n=0}^{\infty} c_n(\alpha)\,|n\rangle$. Ako, zatim, indeks $n$ u sumama zamenimo indeksom $n'$, a onda obe strane jednakosti skalarno pomnožimo vektorom $|n\rangle$, koristeći ortonormiranost ovih vektora ($\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$, $\langle n|n'-1\rangle = \delta_{n,n'-1} \equiv \delta_{n+1,n'}$), sledi

$$c_{n+1}(\alpha)\sqrt{n+1} = \alpha\, c_n(\alpha). \tag{7.57}$$

Uzastopnom primenom ove relacije, polazeći od $n = 0$, dobijamo

$$c_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\, c_0(\alpha). \tag{7.58}$$

Koeficijent $c_0(\alpha)$ određujemo iz uslova normiranja vektora $|\alpha\rangle$. Pretpostavljajući da ovi vektori pripadaju prostoru stanja oscilatora, normiraćemo ih na jedinicu. Uslov $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ ekvivalentan je uslovu $\sum_n |c_n(\alpha)|^2 = 1$, a uzimajući da je koeficijent $c_0(\alpha)$ realan broj, poslednji uslov daje $[c_0(\alpha)]^2\sum_n |\alpha|^{2n}/n! \equiv [c_0(\alpha)]^2 e^{|\alpha|^2} = 1$, odnosno $c_0(\alpha) = \pm e^{-|\alpha|^2/2}$. Očigledno, za svako $\alpha \in \mathbb{C}$ postoji koeficijent $c_0(\alpha) \in \mathbb{R}$, određen do na znak, takav da je odgovarajući svojstveni vektor $|\alpha\rangle$ normiran na jedinicu. Konačno, ako za $c_0(\alpha)$ izaberemo pozitivnu vrednost, imamo

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \tag{7.59}$$

Pošto su za dato $c_0(\alpha)$ ostali koeficijenti $c_n(\alpha)$ jednoznačno određeni relacijom (7.58), za svaku kompleksnu vrednost $\alpha$ postoji do na fazni faktor određen normirani svojstveni vektor $|\alpha\rangle$ čiji je reprezent vektor (7.59). Prema tome, spektar operatora $\hat{a}$ je neprekidan i nedegenerisan i čini ga ceo skup $\mathbb{C}$. Poslednja činjenica, kao i činjenica da je norma svojstvenih vektora ovog operatora konačna, iako je njegov spektar neprekidan, posledice su njegovog neermitskog karaktera. Uočimo da u specijalnom slučaju kada je $\alpha = 0$ svi koeficijenti $c_n(\alpha)$ postaju nule, osim koeficijenta $c_0(\alpha)$ koji prelazi u jedinicu, čime se razvoj (7.59) svodi na jedan član – osnovno stanje oscilatora

$$|\alpha\!=\!0\rangle = |0\rangle. \tag{7.60}$$

Primetimo, takođe, da ovaj rezultat neposredno sledi iz svojstvenog problema (7.55), koji za $\alpha = 0$ ima oblik $\hat{a}|\alpha\!=\!0\rangle = 0$, i uslova (7.48) [6].

Da bismo proučili ponašanje linearnog harmonijskog oscilatora u stanjima $|\alpha\rangle$, odredićemo srednje vrednosti relevantnih operatora, a potom ćemo izračunati neodređenosti koordinate i impulsa oscilatora u tim stanjima. Polazeći od svojstvenog problema operatora anihilacije (7.55) i odgovarajuće ermitski konjugovane jednačine

$$\langle\alpha|\hat{a}^+ = \alpha^*\langle\alpha| \tag{7.61}$$

dobijamo izraze za srednje vrednosti operatora $\hat{a}$, $\hat{a}^+$, $\hat{N}$ i $\hat{H}$ u stanju $|\alpha\rangle$

$$\langle\hat{a}\rangle_\alpha \equiv \langle\alpha|\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha, \tag{7.62}$$

$$\langle\hat{a}^+\rangle_\alpha \equiv \langle\alpha|\hat{a}^+|\alpha\rangle = \alpha^*, \tag{7.63}$$

$$\langle\hat{N}\rangle_\alpha = \langle\alpha|\hat{a}^+\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha^*\alpha = |\alpha|^2, \tag{7.64}$$

$$\langle\hat{H}\rangle_\alpha = \langle\alpha|\hbar\omega\left(\hat{N} + \tfrac{1}{2}\right)|\alpha\rangle = \hbar\omega\left(|\alpha|^2 + \tfrac{1}{2}\right). \tag{7.65}$$

Uočimo da na osnovu izraza (7.59) rezultat merenja energije oscilatora u koherentnom stanju $|\alpha\rangle$, ukoliko je $\alpha \neq 0$, može da bude bilo koji od energijskih nivoa $E_n$, određenih izrazom (7.50), sa verovatnoćom

$$\mathcal{P}_n(\alpha) = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = e^{-|\alpha|^2} \frac{\alpha^{2n}}{n!}. \tag{7.66}$$

Raspodela verovatnoće po vrednostima kvantnog broja $n$ je Puasonova i ona ima maksimum za vrednost $n$ koja je jednaka celobrojnom delu od $|\alpha|^2$, dakle celobrojnom delu srednje vrednosti operatora kvantog broja.

[6] Pokazuje se da kreacioni operator, za razliku od anihilacionog, nema nijedan svojstveni vektor, što se može objasniti činjenicom da njegovim delovanjem nijedan vektor ne prelazi u nulti.

Koristeći izraze (7.62) i (7.63) i relacije

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\hat{a}^+ + \hat{a}), \tag{7.67}$$

$$\hat{p}_x = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,(\hat{a}^+ - \hat{a}), \tag{7.68}$$

koje neposredno slede iz relacija (7.31) i (7.32), dobijamo izraze za srednje vrednosti operatora koordinate i impulsa u stanju $|\alpha\rangle$

$$\langle\hat{x}\rangle_\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\alpha^* + \alpha) \equiv \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,\mathrm{Re}\,\alpha, \tag{7.69}$$

$$\langle\hat{p}_x\rangle_\alpha = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,(\alpha^* - \alpha) \equiv \sqrt{2m\hbar\omega}\,\mathrm{Im}\,\alpha. \tag{7.70}$$

Pošto se kvadrati operatora koordinate i impulsa mogu izraziti preko operatora anihilacije i kreacije u obliku $\hat{x}^2 = (\hbar/2m\omega)[(\hat{a}^+)^2 + 2\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^2 + 1]$ i $\hat{p}_x^2 = -(m\hbar\omega/2)[(\hat{a}^+)^2 - 2\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^2 - 1]$, njihove srednje vrednosti glase

$$\langle\hat{x}^2\rangle_\alpha = \frac{\hbar}{2m\omega}\,[(\alpha^* + \alpha)^2 + 1], \tag{7.71}$$

$$\langle\hat{p}_x^2\rangle_\alpha = \frac{m\hbar\omega}{2}\,[1 - (\alpha^* - \alpha)^2]. \tag{7.72}$$

Koristeći ove izraze i izraz (3.48) za srednje kvadratno odstupanje, dobijamo da su neodređenosti koordinate i impulsa u stanju $|\alpha\rangle$

$$\Delta x \equiv \sqrt{\langle\hat{x}^2\rangle_\alpha - \langle\hat{x}\rangle_\alpha^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \tag{7.73}$$

$$\Delta p_x \equiv \sqrt{\langle\hat{p}_x^2\rangle_\alpha - \langle\hat{p}_x\rangle_\alpha^2} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}. \tag{7.74}$$

Uočimo da ove vrednosti ne zavise od $\alpha$ i da je njihov proizvod

$$\Delta x\,\Delta p_x = \frac{\hbar}{2}. \tag{7.75}$$

Prema tome, neodređenost koordinate i impulsa u stanjima $|\alpha\rangle$ je minimalna (v. relacije (3.180)), što znači da ova stanja predstavljaju *koherentna stanja* linearnog harmonijskog oscilatora (v. odeljak 3.4.10), u kojima je njegovo ponašanje najbliže ponašanju klasičnog oscilatora.

Koherentna stanja oscilatora, kao što smo videli, imaju konačnu normu, međutim, ona nisu međusobno ortogonalna. Naime, koristeći razvoj (7.59) i ortonormiranost svojstvenih vektora hamiltonijana, dobijamo da je

$$\langle\alpha|\alpha'\rangle = e^{-(|\alpha|^2+|\alpha'|^2)/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha^*\alpha')^n}{n!} = e^{-(|\alpha|^2+|\alpha'|^2-2\alpha^*\alpha')/2} \neq 0, \quad \forall\alpha,\alpha' \in \mathbb{C}. \tag{7.76}$$

Odavde zaključujemo da svako koherentno stanje $|\alpha\rangle$ sadrži komponente svih ostalih koherentnih stanja oscilatora. Drugim rečima, skup svojstvenih vektora operatora $\hat{a}$ nije linearno nezavisan i to je još jedna posledica njegovog neermitskog karaktera.

Na osnovu navedenih osobina moglo bi se očekivati da skup vektora $\{|\alpha\rangle, \forall\alpha \in \mathbb{C}\}$ ne zadovoljava ni relaciju zatvorenosti. Ovo, međutim, nije tačno. Da bismo to potvrdili izračunaćemo integral $\int |\alpha\rangle\langle\alpha|\, \mathrm{d}^2\alpha$, gde je $\mathrm{d}^2\alpha = \mathrm{d}(\mathrm{Re}\,\alpha)\,\mathrm{d}(\mathrm{Im}\,\alpha)$. Ako opet iskoristimo razvoj (7.59), zamenimo redosled integracije i sumiranja, a zatim vrednosti $\alpha$ napišemo u polarnom obliku $\alpha = \rho\, e^{i\phi}$, imamo

$$\begin{aligned}\int |\alpha\rangle\langle\alpha|\, \mathrm{d}^2\alpha &= \int e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{n'=0}^{\infty} \frac{(\alpha^*)^n \alpha^{n'}}{\sqrt{n!n'!}} |n\rangle\langle n'|\, \mathrm{d}^2\alpha \\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{n'=0}^{\infty} \frac{|n\rangle\langle n'|}{\sqrt{n!n'!}} \int_0^{\infty} e^{-\rho^2}\rho^{n+n'}\rho\,\mathrm{d}\rho \int_0^{2\pi} e^{i(n'-n)\phi}\mathrm{d}\phi,\end{aligned} \tag{7.77}$$

gde je sada $\mathrm{d}^2\alpha = \rho\,\mathrm{d}\rho\,\mathrm{d}\phi$. Pošto radijalni i ugaoni integral u poslednjem izrazu imaju vrednosti $[(n+n')/2]!/2$, odnosno $2\pi\delta_{n'n}$, sledi

$$\int |\alpha\rangle\langle\alpha|\, \mathrm{d}^2\alpha = \pi \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{n'=0}^{\infty} \frac{|n\rangle\langle n'|}{\sqrt{n!n'!}} \left(\frac{n+n'}{2}\right)!\, \delta_{n'n} = \pi \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \pi\hat{I}, \tag{7.78}$$

pri čemu je iskorištena relacija zatvorenosti skupa svojstvenih vektora hamiltonijana $\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \hat{I}$ (v. relaciju (6.43)). Konačno, relacija zatvorenosti skupa svojstvenih vektora operatora anihilacije može se napisati u obliku

$$\frac{1}{\pi}\int |\alpha\rangle\langle\alpha|\, \mathrm{d}^2\alpha = \hat{I}. \tag{7.79}$$

Navedena relacija garantuje da se proizvoljno stanje oscilatora može razložiti po skupu koherentnih stanja. S druge strane, pošto taj skup nije linearno nezavisan, kažemo da je on *prekompletan* bazis u prostoru stanja oscilatora.

### 7.2.3 Evolucija koherentnih stanja oscilatora

Određivanje promene koherentnih stanja linearnog harmonijskog oscilatora u toku vremena predstavlja primer računanja evolucije jednog nestacionarnog stanja.

Neka se oscilator u trenutku $t = 0$ nalazi u koherentnom stanju $|\alpha_0\rangle$, koje na osnovu razvoja (7.59) glasi

$$|\psi(t_0)\rangle = |\alpha_0\rangle = e^{-|\alpha_0|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \tag{7.80}$$

Predstavljajući rešenje Šredingerove jednačine u obliku razvoja (6.78) po stacionarnim stanjima koja su u ovom slučaju opisana vektorima $|n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$, gde su energije $E_n$ određene izrazom (7.50), stanje oscilatora u proizvoljnom trenutku $t$ biće

$$
\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= e^{-|\alpha_0|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\\
&= e^{-i\omega t/2}e^{-|\alpha_0|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}}e^{-in\omega t}|n\rangle\\
&= e^{-i\omega t/2}e^{-|\alpha(t)|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{[\alpha(t)]^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle,
\end{aligned}
\tag{7.81}
$$

gde je

$$\alpha(t) = \alpha_0\, e^{-i\omega t}. \tag{7.82}$$

Konačno, pozivajući se na razvoj (7.59), možemo pisati

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2}|\alpha(t)\rangle. \tag{7.83}$$

Prema tome, koherentno stanje oscilatora ostaje u toku vremena svojstveni vektor operatora anihilacije, ali sa kompleksnom svojstvenom vrednošću čija se faza periodično menja po formuli (7.82). Uz to, svojstveni vektor ima dodatni fazni faktor $e^{-i\omega t/2}$, koji ne menja njegovo fizičko značenje.

Na osnovu gore navedenog, srednja vrednost neke opservable $\hat{A}$, računata u stanju (7.83), ista je kao i u stanju $|\alpha(t)\rangle$, tj.

$$\langle\hat{A}\rangle(t) \equiv \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \langle\alpha(t)|\hat{A}|\alpha(t)\rangle \equiv \langle\hat{A}\rangle_{\alpha(t)}. \tag{7.84}$$

Polazeći od ove jednakosti i relacije (7.82), iz koje proizilazi da je $|\alpha(t)| = |\alpha_0|$, te izraza (7.64) i (7.65), sledi da za srednje vrednosti operatora $\hat{N}$ i $\hat{H}$ u stanju (7.83) važi $\langle\hat{N}\rangle(t) = \langle\hat{N}\rangle_{\alpha_0}$ i $\langle\hat{H}\rangle(t) = \langle\hat{H}\rangle_{\alpha_0}$, tj. one se ne menjaju u toku vremena.

Što se tiče srednjih vrednosti koordinate i impulsa, na osnovu jednakosti (7.84) i izraza (7.69) i (7.70), dobijamo

$$\langle\hat{x}\rangle(t) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,\mathrm{Re}\,\alpha(t) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,|\alpha_0|\cos(\omega t - \phi_0), \tag{7.85}$$

$$\langle\hat{p}_x\rangle(t) = \sqrt{2m\hbar\omega}\,\mathrm{Im}\,\alpha(t) = -\sqrt{2m\hbar\omega}\,|\alpha_0|\sin(\omega t - \phi_0), \tag{7.86}$$

gde je $\phi_0$ faza početne svojstvene vrednosti $\alpha_0 = |\alpha_0|e^{i\phi_0}$. Uočimo da se srednje vrednosti položaja i impulsa kvantnog oscilatora u toku vremena menjaju na isti način kao kod klasičnog sistema[7]. S druge strane, neodređenosti koordinate i impulsa oscilatora, s obzirom na to da ne zavise od $\alpha$, imaju u stanju (7.83) iste minimalne vrednosti kao i u početnom koherentnom stanju, tj. date su izrazima (7.73) i (7.74). Iz navedenih razloga koherentna stanja često se nazivaju i „klasična stanja". Ova stanja se realizuju i imaju poseban značaj u kvantnoj optici.

[7] Hamiltonove jednačine, koje opisuju klasičnu dinamiku linearnog harmonijskog oscilatora, imaju oblik $\mathrm{d}x/\mathrm{d}t = p_x/m$, $\mathrm{d}p_x/\mathrm{d}t = -m\omega^2 x$. S druge strane, ako diferenciramo izraze za srednje vrednosti (7.85) i (7.86), nakon sređivanja dobijamo $\mathrm{d}\langle\hat{x}\rangle/\mathrm{d}t = \langle\hat{p}_x\rangle/m$, $\mathrm{d}\langle\hat{p}_x\rangle/\mathrm{d}t = -m\omega^2\langle\hat{x}\rangle$. Dakle, sistem jednačina za $\langle\hat{x}\rangle$ i $\langle\hat{p}_x\rangle$ istog je oblika kao sistem jednačina za klasične varijable $x$ i $p_x$. Napomenimo, takođe, da se sistem diferencijalnih jednačina za srednje vrednosti poklapa sa tzv. Erenfestovim jednačinama za linearni harmonijski oscilator (v. odeljak 4.3.2, fusnota 3).

### 7.2.4 Druga kvantizacija i Fokov prostor

U odeljku 7.2.1 uveli smo operatore $\hat{a}$ i $\hat{a}^+$ kao pomoćne operatore u cilju rešavanja svojstvenog problema hamiltonijana linearnog harmonijskog oscilatora algebarskim putem. Pokazali smo da ti operatori prevode stanje oscilatora u novo stanje u kome on ima jedan kvant energije $\hbar\omega$ manje, odnosno kvant energije više u odnosu na početno stanje, zbog čega su oni nazvani operatorima anihilacije i kreacije. Takođe smo uveli operator $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$, čije svojstvene vrednosti $n$ predstavljaju broj kvanata energije oscilatora u svojstvenim stanjima hamiltonijana oscilatora $\hat{H}$ (izraz (7.30)), tj. kvantne brojeve tih stanja. Shodno tome, operator $\hat{N}$ je nazvan operator kvantnog broja.

Svojstveni problem hamiltonijana linearnog harmonijskog oscilatora, međutim, može se interpretirati i na drugi način. Pošto su energijski nivoi oscilatora ekvidistantni, pri čemu je razmak među susednim nivoima $\hbar\omega$, može se uzeti da hamiltonijan $\hat{H}$ predstavlja hamiltonijan sistema identičnih čestica koje su sve u istom stanju sa energijom $\hbar\omega$, ali je njihov broj jednak kvantnom broju $n$. Broj čestica tako definisanog sistema očigledno može da varira, a svako svojstveno stanje hamiltonijana $\hat{H}$ odgovara određenoj vrednosti tog broja, a time i određenoj vrednosti energije celokupnog sistema. Prema tome, vektor $|n\rangle$ u ovoj interpretaciji predstavlja stanje sistema koji se sastoji od $n$ čestica u istom jednočestičnom stanju. Vektor osnovnog stanja oscilatora $|0\rangle$ ovde odgovara sistemu čiji je broj čestica jednak nuli, zbog čega se ovo stanje naziva *stanje vakuuma*. Kao što smo već videli, energija vakuuma nije nula, već iznosi $\hbar\omega/2$. Operatori $\hat{a}$ i $\hat{a}^+$ u ovoj interpretaciji transformišu stanje sistema sa $n$ čestica u stanje sa $n-1$, odnosno $n+1$ čestica, i nazivamo ih *operatorima anihilacije*, odnosno *kreacije čestica*. U istom kontekstu operator $\hat{N}$ nazivamo *operator broja čestica*.

Da bi opis stanja preko broja čestica bio primenljiv na realistične sisteme, treba ga uopštiti tako da čestice mogu biti u različitim stanjima. Takav opis sistema identičnih čestica obično se naziva *formalizam druge kvantizacije*. Za razliku od standardnog opisa (tzv. prve kvantizacije), gde se postavlja pitanje u kom stanju se nalazi svaka čestica sistema[8], u formalizmu druge kvantizacije pitamo se koliko čestica ima u svakom stanju. U tom slučaju vektore stanja višečestičnog sistema pišemo u obliku

$$|n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle, \tag{7.87}$$

gde je $n_i$ broj čestica u $i$-tom jednočestičnom stanju. Brojevi $n_i$, $i = 1, 2, \ldots$, nazivaju se *brojevi popunjenosti* odgovarajućih jednočestičnih stanja. Stanja predstavljena vektorima (7.87) zovu se *Fokova stanja* (Владимир Фок). Ovi vektori se, u zavisnosti od simetrije sistema u odnosu na izmenu čestica, koju ćemo proučiti u glavi 12, konstruišu kao simetrizovani, odnosno antisimetrizovani proizvodi Fokovih stanja $i$-te vrste $|n_i\rangle \equiv |\ldots, 0, n_i, 0, \ldots\rangle$. Skup svih Fokovih stanja čini bazis u Hilbertovom prostoru sistema sa proizvoljnim brojem identičnih čestica, koji nazivamo *Fokov prostor*.

[8] Odgovor na ovo pitanje u principu je moguće dobiti jedino u slučaju neinteragujućih čestica. Ukoliko postoji interakcija među česticama (bar privremeno), pokazuje se da je ukupni sistem u tzv. upletenom stanju (eng. *entangled state*), koje ima oblik linearne kombinacije proizvoda stanja pojedinačnih slobodnih čestica. To znači da nije moguće definisati čista stanja pojedinačnih čestica ukoliko one interaguju.

Stanje vakuuma napisano u formi (7.87) je Fokovo stanje kod koga su svi brojevi popunjenosti jednaki nuli, tj.

$$|0\rangle \equiv |0, 0, \ldots, 0, \ldots\rangle. \tag{7.88}$$

Formalizam druge kvantizacije uvodi onoliko operatora anihilacije i kreacije, $\hat{a}_i$ i $\hat{a}_i^+$, koliko ima različitih jednočestičnih stanja sistema (najčešće neograničeno). Pri tome, delovanje operatora $\hat{a}_i$ i $\hat{a}_i^+$ na proizvoljno Fokovo stanje smanjuje, odnosno povećava broj popunjenosti $n_i$ za jedan, dok ostali brojevi ostaju nepromenjeni. Odatle sledi da se, polazeći od stanja vakuuma, svako Fokovo stanje može, analogno kao kod oscilatora, formirati višestrukim delovanjem operatora kreacije.

Formalizam druge kvantizacije široko se koristi u teoriji vibracija kristalne rešetke i u kvantnoj teoriji polja. Elektromagnetno polje, na primer, može se predstaviti u obliku superpozicije ravnih talasa koji su okarakterisani vektorom polarizacije $\boldsymbol{\epsilon}$ i talasnim vektorom $\mathbf{k}$. Odatle sledi da se hamiltonijan kvantovanog elektromagnetnog polja može napisati u obliku sume članova oblika (7.30) od kojih se svaki odnosi na foton (kvant elektromagnetnog polja) okarakterisan određenim vrednostima parametara $\mathbf{k}$ i $\boldsymbol{\epsilon}$, dakle

$$\hat{H} = \sum_i \hbar\omega_i (\hat{a}_i^+ \hat{a}_i + \tfrac{1}{2}), \tag{7.89}$$

gde indeks $i$ prebrojava različite vrednosti ta dva parametra. Operatori $\hat{a}_i^+$ i $\hat{a}_i$ se, pri tome, tumače kao operatori kreacije, odnosno anihilacije fotona $i$-tog tipa, a vektor (7.87) opisuje stanje polja sa $n_1$ fotona prvog tipa, $n_2$ fotona drugog tipa itd. Ovi vektori su svojstveni vektori hamiltonijana (7.89) i u stanjima koja opisuju polje ima energiju

$$E = \sum_i \hbar\omega_i (n_i + \tfrac{1}{2}). \tag{7.90}$$

Uočimo da je, analogno pojedinačnom oscilatoru, energija elektromagnetnog polja u stanju vakuuma $E_0$ različita od nule, štaviše zbog beskonačnog broja stepeni slobode sledi

$$E_0 = \tfrac{1}{2} \sum_i \hbar\omega_i = \infty. \tag{7.91}$$

# 8 Teorija reprezentovanja

Na početku glave 6 objašnjeno je kako se, polazeći od talasne mehanike u kojoj se stanja kvantnog sistema opisuju talasnim funkcijama, tj. elementima funkcionalnog Hilbertovog prostora $\mathcal{L}^2$, na osnovu izomorfizma između tog prostora i nekog apstraktnog Hilbertovog prostora $\mathcal{H}$, može preći na opštu formulaciju kvantne mehanike u kojoj su stanja predstavljena vektorima iz $\mathcal{H}$. Analogno se moglo poći i od Hajzenbergove matrične mehanike (Werner Heisenberg) i preći na opštu formulaciju na osnovu izomorfizma između prostora $\ell^2$, čiji su elementi beskonačne kompleksne matrice kolone konačne norme, i apstraktnog Hilbertovog prostora $\mathcal{H}$. Ako sada pođemo obratno, tj. od opšte formulacije, talasna i matrična mehanika pojavljuju se kao njene specifične reprezentacije.

U ovoj glavi prvo ćemo predstaviti opštu teoriju reprezentovanja, a zatim proučiti najčešće korišćene reprezentacije – koordinatnu, impulsnu i energijsku reprezentaciju, kao i tzv. $N$-reprezentaciju. U praksi se pokazalo da zavisno od konkretnog problema neka specifična reprezentacija može biti posebno pogodna za njegovo analiziranje i rešavanje. Videćemo da prelazak sa jedne reprezentacije na drugu predstavlja jednu vrstu unitarnih transformacija. Osobine unitarnih trasformacija biće detaljnije proučene u sledećoj glavi koja je posvećena prostornim i vremenskim transformacijama.

## 8.1 Opšta teorija reprezentovanja

Svakom vektoru iz apstraktnog Hilbertovog prostora može se jednoznačno pridružiti skup koeficijenata razvoja tog vektora u svojstvenom bazisu neke opservable $\hat{A}$ koja je u tom prostoru kompletna[1], a svakom operatoru koji deluje u istom prostoru odgovarajući skup matričnih elemenata (v. odeljke 2.1.3 i 2.2.2). Za ove skupove kažemo da reprezentuju posmatrani vektor, odnosno operator u svojstvenom bazisu opservable $\hat{A}$, a pomenuto pridruživanje naziva se *$A$-reprezentacija*.

Spektar opservable može biti diskretan, neprekidan ili mešovit i to isto važi i za njen svojstveni bazis. Međutim, pri definisanju reprezentacije obično se bira kompletna opservabla sa čisto diskretnim ili sa čisto neprekidnim spektrom. Prema tome, zavisno od tipa bazisa, reprezentacija može biti *diskretna* ili *neprekidna*.

[1] Ako izabrana opservabla nije kompletna, što je u praksi česta situacija, potrebno ju je dopuniti do kompletnog skupa kompatibilnih opservabli (v. odeljak 3.4.11).

### 8.1.1 Reprezentovanje vektora

Ako opservabla $\hat{A}$ ima čisto *diskretan spektar* $\{a_n\}$, njen svojstveni bazis $\{|n\rangle\}$ je prebrojiv, a vektori $|n\rangle$ imaju konačnu normu. Normiranjem ovih vektora na jedinicu bazis će biti ortonormiran i razvoj vektora $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ u njemu glasi (v. odeljak 6.2.6)

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle|n\rangle. \tag{8.1}$$

Reprezentacija vektora $|\psi\rangle$ u ovom je slučaju *diskretna* i čini je skup koeficijenata $\psi_n = \langle n|\psi\rangle$ koji formiraju matricu kolonu (v. takođe odeljak 6.2.8), dakle

$$|\psi\rangle \to \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{8.2}$$

Skalarni proizvod vektora $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ u diskretnoj reprezentaciji izračunava se preko njihovih koeficijenata u toj reprezentaciji

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\hat{I}|\phi\rangle = \langle\psi|\left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right)|\phi\rangle = \sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\phi\rangle = \sum_n \psi_n^* \phi_n. \tag{8.3}$$

U ovom izvođenju iskorištena je relacija zatvorenosti tipa (6.43). Uzimajući da je $|\phi\rangle = |\psi\rangle$, iz relacije (8.3) sledi da kvadrat norme matrice kolone koja reprezentuje vektor $|\psi\rangle$ iznosi $\sum_n |\psi_n|^2 \equiv \sum_n \psi_n^* \psi_n = \langle\psi|\psi\rangle < +\infty$, što znači da ona pripada prostoru $\ell^2$ (prostoru beskonačnih kompleksnih matrica kolona konačne norme).

Ako opservabla $\hat{A}$ ima čisto *neprekidan spektar* $\{a\}$, njen svojstveni bazis $\{|a\rangle\}$ je neprebrojiv, a vektori $|a\rangle$ nemaju konačnu normu i obično se normiraju na delta funkciju. Razvoj vektora $|\psi\rangle$ po tom bazisu tada ima oblik

$$|\psi\rangle = \int \langle a|\psi\rangle|a\rangle \mathrm{d}a. \tag{8.4}$$

U ovom slučaju vektor $|\psi\rangle$ se reprezentuje *neprekidnim* skupom Furijeovih koeficijenata $\psi(a) = \langle a|\psi\rangle$ koji se naziva *funkcija stanja* u A-reprezentaciji, dakle

$$|\psi\rangle \to \psi(a) = \langle a|\psi\rangle. \tag{8.5}$$

Skalarni proizvod vektora $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ u neprekidnoj reprezentaciji računa se preko odgovarajućih funkcija stanja. Koristeći relaciju zatvorenosti tipa (6.44), dobija se

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\hat{I}|\phi\rangle = \langle\psi|\left(\int |a\rangle\langle a|\mathrm{d}a\right)|\phi\rangle = \int \langle\psi|a\rangle\langle a|\phi\rangle \mathrm{d}a = \int \psi^*(a)\phi(a)\mathrm{d}a. \tag{8.6}$$

Odavde sledi da kvadrat norme funkcije $\psi(a)$ koja reprezentuje vektor $|\psi\rangle$ iznosi $\int |\psi(a)|^2 \mathrm{d}a = \langle\psi|\psi\rangle < +\infty$, tj. $\psi(a) \in \mathcal{L}^2$ (prostor kvadratno integrabilnih funkcija).

Ako je vektor stanja $|\psi\rangle$ normiran na jedinicu, na osnovu postulata o verovatnoći, za koeficijente razvoja tog vektora u svojstvenom bazisu opservable $\hat{A}$ u slučajevima diskretnog i neprekidnog spektra važi

$$|\psi_n|^2 = |\langle n|\psi\rangle|^2 = \mathcal{P}(a_n), \tag{8.7}$$

odnosno

$$|\psi(a)|^2 = |\langle a|\psi\rangle|^2 = \frac{d\mathcal{P}(a)}{da} \equiv \rho(a). \tag{8.8}$$

Dakle, kvadrati modula ovih koeficijenata predstavljaju *verovatnoću*, odnosno *gustinu verovatnoće*, da se merenjem veličine $A$ u stanju $|\psi\rangle$ dobije rezultat $a_n$, odnosno $a$. Sami koeficijenti razvoja se u tom smislu nazivaju *amplitude verovatnoće* dobijanja odgovarajućeg rezultata merenja.

### 8.1.2 Reprezentovanje operatora

Reprezentacija operatora se nalazi polazeći od reprezentacije vektora koji pripadaju prostoru delovanja tog operatora. Neka je $|\psi\rangle$ proizvoljni vektor iz prostora u kome deluje operator $\hat{C}$ i neka je taj prostor takođe kodomen ovog operatora. Tada je

$$\hat{C}|\psi\rangle = |\phi\rangle \tag{8.9}$$

vektor iz istog prostora. Skalarnim množenjem ove jednakosti elementom $|n\rangle$ *diskretnog* svojstvenog bazisa kompletne opservable $\hat{A}$ sledi

$$\langle n|\hat{C}|\psi\rangle = \langle n|\phi\rangle. \tag{8.10}$$

Koristeći razlaganje $\langle n|\hat{C}|\psi\rangle = \langle n|\hat{C}\hat{I}|\psi\rangle = \langle n|\hat{C}(\sum_{n'}|n'\rangle\langle n'|)|\psi\rangle = \sum_{n'}\langle n|\hat{C}|n'\rangle\langle n'|\psi\rangle$, imamo

$$\sum_{n'}\langle n|\hat{C}|n'\rangle\langle n'|\psi\rangle = \langle n|\phi\rangle, \tag{8.11}$$

odnosno

$$\sum_{n'} C_{nn'}\,\psi_{n'} = \phi_n,\ \forall n, \tag{8.12}$$

gde su

$$C_{nn'} = \langle n|\hat{C}|n'\rangle \tag{8.13}$$

matrični elementi operatora $\hat{C}$, a $\psi_n = \langle n|\psi\rangle$ i $\phi_n = \langle n|\phi\rangle$ koeficijenti razvoja vektora $|\psi\rangle$ i $|\phi\rangle$ u svojstvenom bazisu opservable $\hat{A}$. Skup matričnih elemenata (8.13), odnosno odgovarajuća matrica predstavlja *diskretnu A-reprezentaciju operatora* $\hat{C}$, dakle

$$\hat{C} \;\to\; \mathsf{C} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots \\ C_{21} & C_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \tag{8.14}$$

a sistem jednačina (8.12) ekvivalentan je matričnoj jednačini $\mathsf{C}\Psi = \Phi$, gde su $\Psi$ i $\Phi$ matrice kolone koje reprezentuju vektore $|\psi\rangle$ i $|\phi\rangle$.

Skalarnim množenjem jednakosti (8.9) elementom $|a\rangle$ *neprekidnog* svojstvenog bazisa kompletne opservable $\hat{A}$ dobijamo A-reprezentaciju te jednakosti

$$\langle a|\hat{C}|\psi\rangle = \langle a|\phi\rangle, \tag{8.15}$$

gde su vektori $\hat{C}|\psi\rangle$ i $|\phi\rangle$ predstavljeni funkcijama $\langle a|\hat{C}|\psi\rangle$ i $\langle a|\phi\rangle$. Koristeći razlaganje $\langle a|\hat{C}|\psi\rangle = \langle a|\hat{C}\hat{I}|\psi\rangle = \langle a|\hat{C}\left(\int|a'\rangle\langle a'|\right)|\psi\rangle\mathrm{d}a' = \int\langle a|\hat{C}|a'\rangle\langle a'|\psi\rangle\mathrm{d}a'$, sledi

$$\int\langle a|\hat{C}|a'\rangle\langle a'|\psi\rangle\mathrm{d}a' = \langle a|\phi\rangle, \tag{8.16}$$

što ćemo pisati u obliku

$$\int C(a,a')\psi(a')\mathrm{d}a' = \phi(a). \tag{8.17}$$

Funkcija

$$C(a,a') = \langle a|\hat{C}|a'\rangle \tag{8.18}$$

je uopštenje pojma matričnog elementa operatora na slučaj neprekidnog bazisa i naziva se *jezgro integralnog operatora*. Prema tome, jezgro (8.18) je *neprekidna A-reprezentacija operatora* $\hat{C}$, a rezultat delovanja ovog operatora na vektor $|\psi\rangle$ predstavljen je integralom na levoj strani jednakosti (8.17), dakle

$$\hat{C}|\psi\rangle \;\rightarrow\; \langle a|\hat{C}|\psi\rangle = \int C(a,a')\psi(a')\mathrm{d}a'. \tag{8.19}$$

### 8.1.3 Srednja vrednost opservable

Polazeći od formule za srednju vrednost opservable $\hat{C}$ u stanju opisanom vektorom $|\psi\rangle$ i koristeći relaciju zatvorenosti diskretnog bazisa $\{|n\rangle\}$, dobija se izraz za srednju vrednost te opservable u diskretnoj reprezentaciji

$$\begin{aligned}\langle\hat{C}\rangle = \langle\psi|\hat{C}|\psi\rangle &= \langle\psi|\hat{I}\hat{C}\hat{I}|\psi\rangle = \langle\psi|\left(\sum_n|n\rangle\langle n|\right)\hat{C}\left(\sum_{n'}|n'\rangle\langle n'|\right)|\psi\rangle \\ &= \sum_n\sum_{n'}\langle\psi|n\rangle\langle n|\hat{C}|n'\rangle\langle n'|\psi\rangle = \sum_n\sum_{n'}\psi_n^*C_{nn'}\psi_{n'},\end{aligned} \tag{8.20}$$

što se može napisati u matričnom obliku

$$\langle\hat{C}\rangle = (\psi_1^*\,\psi_2^*\,\cdots)\begin{pmatrix}C_{11} & C_{12} & \cdots \\ C_{21} & C_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots\end{pmatrix}. \tag{8.21}$$

Na analogan način, koristeći relaciju zatvorenosti neprekidnog bazisa $\{|a\rangle\}$, dobija se odgovarajući izraz za srednju vrednost u neprekidnoj reprezentaciji

$$\begin{aligned}\langle\hat{C}\rangle = \langle\psi|\hat{C}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{I}\hat{C}\hat{I}|\psi\rangle &= \int\int\langle\psi|a\rangle\langle a|\hat{C}|a'\rangle\langle a'|\psi\rangle\mathrm{d}a\,\mathrm{d}a' \\ &= \int\int\psi^*(a)C(a,a')\psi(a')\mathrm{d}a\,\mathrm{d}a'.\end{aligned} \tag{8.22}$$

### 8.1.4 Svojstveni problem operatora u diskretnoj reprezentaciji

Skalarnim množenjem elementima diskretnog ortonormiranog bazisa $\{|n\rangle\}$, svojstveni problem operatora $\hat{A}$

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle, \tag{8.23}$$

uz razlaganje $\langle n|\hat{A}|a\rangle = \sum_{n'}\langle n|\hat{A}|n'\rangle\langle n'|a\rangle$, prelazi u sistem jednačina

$$\sum_{n'}\langle n|\hat{A}|n'\rangle\langle n'|a\rangle = a\langle n|a\rangle,\ \forall n, \tag{8.24}$$

koji predstavlja njegovu reprezentaciju u datom diskretnom bazisu. Koristeći razlaganje $\langle n|a\rangle = \sum_{n'}\delta_{nn'}\langle n'|a\rangle$, ovaj sistem dalje se može napisati u obliku

$$\sum_{n'}(A_{nn'} - a\delta_{nn'})\langle n'|a\rangle = 0,\ \forall n, \tag{8.25}$$

gde su $A_{nn'} = \langle n|\hat{A}|n'\rangle$ matrični elementi matrice $\mathsf{A}$ koja reprezentuje operator $\hat{A}$. Pošto je u pitanju homogen sistem jednačina, on će imati netrivijalna rešenja ukoliko je determinanta sistema jednaka nuli, tj.

$$\det(\mathsf{A} - a\mathsf{I}) = 0, \tag{8.26}$$

gde je $\mathsf{I}$ jedinična matrica. Ako je $N$ broj jednačina sistema[2], ovaj uslov se nakon razvijanja determinante svodi na algebarsku jednačinu $N$-tog reda sa nepoznatom $a$, tzv. *karakterističnu jednačinu*. Njena rešenja (korenovi) $a^{(k)}$, $k = 1, 2, \ldots, K \leq N$, od kojih neka mogu biti višestruka, predstavljaju svojstvene vrednosti operatora $\hat{A}$. Pri tome, ako je $d_k$ multiplicitet (red) korena $a_k$, onda je $\sum_{k=1}^{K} d_k = N$.

U sledećem koraku, da bismo za svaku svojstvenu vrednost $a^{(k)}$ izračunali odgovarajuće svojstvene vektore, jednačinu (8.25) rešavamo $K$ puta, uzimajući za $a$ svaki put drugu svojstvenu vrednost. Ovde razlikujemo dva slučaja:

(i) Ako je $a^{(k)}$ prost koren karakteristične jednačine, od $N$ jednačina sistema (8.25) njih $N - 1$ međusobno je nezavisno. Tada rešenja za svih $N$ koeficijenata $\langle n|a^{(k)}\rangle$ nisu međusobno nezavisna, ali ako jedan od koeficijenata, recimo $\langle 1|a^{(k)}\rangle$, tretiramo kao parametar, dobićemo nehomogen sistem od $N - 1$ linearnih jednačina sa isto toliko nepoznatih $\langle n|a^{(k)}\rangle$ $(n = 2, \ldots, N)$. Za svaku vrednost parametra $\langle 1|a^{(k)}\rangle$ ovaj sistem kao rešenje daje jedan skup vrednosti ostalih $N-1$ koeficijenata, odnosno jedan svojstveni vektor $|a^{(k)}\rangle = \sum_{n=1}^{N}\langle n|a^{(k)}\rangle|n\rangle$. Pošto je vrednost parametra proizvoljna, broj svojstvenih vektora koji odgovaraju svojstvenoj vrednosti $a^{(k)}$ je beskonačan i oni čine jednodimenzioni svojstveni potprostor, što znači da je ta svojstvena vrednost nedegenerisana.

[2] Broj elemenata bazisa, a time i broj jednačina sistema (8.25), je u većini slučajeva beskonačan. Tada, pre nego što se krene sa rešavanjem, sistem je neophodno redukovati na konačan broj jednačina, što se postiže izborom ograničenog bazisa. Ovo ima za posledicu da će i skup rešenja biti redukovan, a sama rešenja biće manje ili više aproksimativna. Da bi se rešenja od interesa odredila sa zadovoljavajućom tačnošću, potrebno je izabrati relevantan i dovoljno veliki redukovani bazis.

(ii) Ukoliko je $a^{(k)}$ višestruki koren karakteristične jednačine reda $d_k > 1$, a operator $\hat{A}$ je ermitski, pokazuje se da od $N$ jednačina sistema (8.25) njih $N - d_k$ biće međusobno nezavisno. Ako, međutim, $d_k$ koeficijenata $\langle n | a^{(k)} \rangle$ tretiramo kao parametre, dobićemo nehomogen sistem od $N - d_k$ linearnih jednačina za isto toliko preostalih koeficijenata kao nepoznatih. Za svaki izbor parametara ovaj sistem kao rešenje daje jedan skup vrednosti ostalih $N - d_k$ koeficijenata $\langle n | a^{(k)} \rangle$, odnosno jedan svojstveni vektor. Pošto su vrednosti parametara proizvoljne, broj svojstvenih vektora koji odgovaraju svojstvenoj vrednosti $a^{(k)}$ je beskonačan i oni, saglasno broju parametara, čine svojstveni potprostor dimenzije $d_k$, što znači da je ova svojstvena vrednost $d_k$ puta degenerisana. Konačno, iz pomenutog potprostora moguće je izdvojiti $d_k$ vektora koji su linearno nezavisni, a zatim pomoću Gram-Šmitovog postupka od njih formirati skup od $d_k$ ortonormiranih svojstvenih vektora.

Pomenimo da se rešavanje svojstvenog problema nekog operatora u diskretnoj reprezentaciji često naziva *dijagonalizacija*, a razlog je taj što je matrica koja reprezentuje taj operator u njegovom svojstvenom bazisu dijagonalna sa svojstvenim vrednostima na dijagonali (v. treću teoremu u odeljku 2.2.5).

### 8.1.5 Transformacije među reprezentacijama

Razmotrićemo prvo prelazak sa diskretne reprezentaciju na drugu, takođe diskretnu reprezentaciju. Neka su $\hat{A}$ i $\hat{B}$ dve opservable sa čisto *diskretnim* i *nedegenerisanim* spektrima i neka su $\{|a_n\rangle\}$ i $\{|b_n\rangle\}$ odgovarajući svojstveni bazisi. Neka je proizvoljno stanje $|\psi\rangle$ dato u A-reprezentaciji, tj. neka je predstavljeno matricom kolonom sa koeficijentima $\langle a_n|\psi\rangle$. Tada je isto stanje u B-reprezentaciji određeno koeficijentima

$$\langle b_n|\psi\rangle = \langle b_n|\hat{I}|\psi\rangle = \langle b_n| \sum_m |a_m\rangle\langle a_m|\psi\rangle = \sum_m \langle b_n|a_m\rangle\langle a_m|\psi\rangle. \tag{8.27}$$

Prema tome, prelazak sa A na B-reprezentaciju zadat je matricom $\mathsf{S}$, čiji elemenati su $S_{nm} = \langle b_n|a_m\rangle$, a sama transformacija u matričnom obliku glasi

$$\begin{pmatrix} \langle b_1|\psi\rangle \\ \langle b_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle a_1|\psi\rangle \\ \langle a_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{8.28}$$

Neka su sada $\psi(\eta)$ i $\psi(\xi)$ dve *neprekidne* reprezentacije stanja $|\psi\rangle$. Prelazak sa $\xi$ na $\eta$-reprezentaciju postiže se transformacijama

$$\begin{aligned} \psi(\eta) \equiv \langle\eta|\psi\rangle = \langle\eta|\hat{I}|\psi\rangle &= \langle\eta| \left( \int |\xi\rangle\langle\xi| \mathrm{d}\xi \right) |\psi\rangle \\ &= \int \langle\eta|\xi\rangle\langle\xi|\psi\rangle \mathrm{d}\xi \equiv \int \langle\eta|\xi\rangle\psi(\xi)\, \mathrm{d}\xi. \end{aligned}$$

Konačna transformacija se može napisati u simboličkom obliku

$$\psi(\eta) = \hat{S}\,\psi(\xi), \tag{8.29}$$

gde je $\hat{S}$ *integralni operator sa jezgrom* $\langle\eta|\xi\rangle$ koje predstavlja analogon matričnih elemenata u slučaju neprekidnih indeksa $\eta$ i $\xi$.

Prelazak sa diskretne reprezentacije na neprekidnu ili obratno postiže se pomoću matričnih elemenata, odnosno jezgra integralnog operatora sa jednim diskretnim i jednim neprekidnim indeksom.

*Inverzna* transformacija (prelazak u obrnutom smeru) ostvaruje se pomoću matrice koja je inverzna matrici $\mathsf{S}$, dakle

$$\langle a_n|\psi\rangle = \sum_m (\mathsf{S}^{-1})_{nm}\langle b_m|\psi\rangle. \tag{8.30}$$

S druge strane je

$$\langle a_n|\psi\rangle = \sum_m \langle a_n|b_m\rangle\langle b_m|\psi\rangle = \sum_m \langle b_m|a_n\rangle^*\langle b_m|\psi\rangle = \sum_m S^*_{mn}\langle b_m|\psi\rangle. \tag{8.31}$$

Poredeći krajnje izraze u ovim transformacijama sledi $(\mathsf{S}^{-1})_{nm} = S^*_{mn}$, odnosno

$$\mathsf{S}^{-1} = \mathsf{S}^{+}. \tag{8.32}$$

Prema tome, matrica transformacije $\mathsf{S}$ je *unitarna*. Analogno, operator transformacije $\hat{S}$ između dve neprekidne reprezentacije je *unitaran* operator.

Neka je $\hat{A}$ ermitski operator u nekoj reprezentaciji (diskretnoj ili neprekidnoj) koji delovanjem na stanje $\psi$ u istoj reprezentaciji (predstavljeno matricom kolonom, odnosno funkcijom) daje stanje $\phi$ u toj reprezentaciji, tj.

$$\hat{A}\psi = \phi. \tag{8.33}$$

Neka je, pored toga, $\hat{S}$ unitarni operator koji stanja iz date reprezentacije prevodi u drugu reprezentaciju (u kojoj su stanja označena primom), dakle

$$\hat{S}\psi = \psi', \quad \hat{S}\phi = \phi'. \tag{8.34}$$

Delujući operatorom $\hat{S}$ na obe strane jednakosti (8.33) i koristeći transformacije $\hat{S}\hat{A}\psi = \hat{S}\hat{A}\hat{I}\psi = \hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1}\hat{S}\psi$, dobijamo $\hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1}\hat{S}\psi = \hat{S}\phi$, odnosno

$$\hat{A}'\psi' = \phi', \tag{8.35}$$

gde je

$$\hat{A}' = \hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1} = \hat{S}\hat{A}\hat{S}^{+}. \tag{8.36}$$

Poslednje relacije predstavljaju transformaciju operatora $\hat{A}$ iz jedne reprezentacije u drugu. Pošto je operator transformacije $\hat{S}$ unitaran, transformacije među reprezentacijama spadaju u tzv. *unitarne transformacije*, o kojima će biti više reči u poglavlju 9.1.

## 8.2 Koordinatna reprezentacija

Reprezentacija definisana vektorskim operatorom $\hat{\mathbf{r}}$ naziva se *koordinatna reprezentacija* u orbitnom prostoru stanja čestice ili $\mathbf{r}$-reprezentacija[3]. Pošto $\hat{\mathbf{r}}$ ima čisto neprekidan spektar (v. odeljak 7.1.3), koordinatna reprezentacija spada u neprekidne reprezentacije.

### 8.2.1 Reprezentovanje stanja

Na osnovu relacije (8.5) iz opšte teorije reprezentovanja, stanje opisano vektorom $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_o$ u koordinatnoj reprezentaciji opisuje se *funkcijom stanja* $\psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2$, poznatom u talasnoj mehanici kao talasna funkcija. Dakle

$$|\psi\rangle \;\rightarrow\; \psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\psi\rangle. \tag{8.37}$$

Skalarni proizvod vektora $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}_o$ u ovoj reprezentaciji glasi

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\hat{I}|\phi\rangle = \int \langle\psi|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\phi\rangle \mathrm{d}^3\mathbf{r} = \int \psi^*(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})\mathrm{d}^3\mathbf{r}, \tag{8.38}$$

pri čemu je iskorištena relacija zatvorenosti (7.20). Pošto je norma vektora $|\psi\rangle$ konačna, iz ovog izraza sledi $\int |\psi(\mathbf{r})|^2 \mathrm{d}^3\mathbf{r} = \langle\psi|\psi\rangle < +\infty$, dakle odgovarajuća talasna funkcija $\psi(\mathbf{r})$ je kvadratno integrabilna, što je poznati uslov iz talasne mehanike (v. odeljak 3.1.5).

Ako je talasna funkcija $\psi(\mathbf{r})$ normirana na jedinicu, na osnovu postulata o verovatnoći (slučaj neprekidnog spektra, relacija (6.62)), sledi

$$|\psi(\mathbf{r})|^2 = |\langle\mathbf{r}|\psi\rangle|^2 = \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}(\mathbf{r})}{\mathrm{d}V} \equiv \rho(\mathbf{r}). \tag{8.39}$$

Dakle, kvadrat modula talasne funkcije predstavlja *gustinu verovatnoće* nalaženja čestice u tački $\mathbf{r}$.

Uočimo da će svojstveni vektori operatora koordinate $\hat{\mathbf{r}}$ u koordinatnoj reprezentaciji biti predstavljeni delta funkcijama (v. takođe odeljak 3.4.8)

$$|\mathbf{r}'\rangle \rightarrow \psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{8.40}$$

U narednom poglavlju (odeljak 8.3.4) videćemo kakvim funkcijama se u koordinatnoj reprezentaciji predstavljaju svojstveni vektori operatora impulsa.

[3] Ova reprezentacija u stvari je definisana kompletnim skupom kompatibilnih opservabli koji čine komponente vektorskog operatora $\hat{\mathbf{r}}$. U slučaju čestice sa samo jednim stepenom slobode, recimo duž x-ose, koordinatna reprezentacija je definisana komponentom $\hat{x}$ koja je kompletna opservabla u prostoru $\mathcal{H}_x$ (v. odeljak 7.1.1). S druge strane, u slučaju sistema koji se sastoji od $N$ realnih čestica, koordinatna reprezentacija u orbitnom prostoru stanja tog sistema definisana je kompletnim skupom kompatibilnih opservabli koji čine sve komponente vektorskih operatora $\hat{\mathbf{r}}_i, i = 1, \ldots, N$. U opštem slučaju, ako se za kompletan skup kompatibilnih opservabli izabere skup operatora svih (generalisanih) koordinata sistema $\{\hat{q}_1, \hat{q}_2, \ldots\}$, koordinatna reprezentacija se često naziva q-reprezentacija.

### 8.2.2 Reprezentovanje operatora

Operator $\hat{A}$, koji deluje u orbitnom prostoru stanja čestice $\mathcal{H}_o$, u koordinatnoj reprezentaciji predstavljen je jezgrom integralnog operatora

$$A(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \langle \mathbf{r}|\hat{A}|\mathbf{r}'\rangle, \tag{8.41}$$

a njegovo delovanje na vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_o$ predstavljeno je delovanjem integralnog operatora sa tim jezgrom na talasnu funkciju $\psi(\mathbf{r})$, dakle

$$\hat{A}|\psi\rangle \;\to\; \int A(\mathbf{r},\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}'. \tag{8.42}$$

Jezgro (8.41) u slučaju operatora koordinate $\hat{\mathbf{r}}$, zahvaljujući relacijama (7.17) i (7.19), ima oblik

$$\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}'\rangle = \langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'|\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{r}'\langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{r}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \tag{8.43}$$

a integral na desnoj strani relacije (8.42) postaje $\int\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}'\rangle\psi(\mathbf{r}')\mathrm{d}^3\mathbf{r}' = \int \mathbf{r}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\times \psi(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}' = \mathbf{r}\,\psi(\mathbf{r})$. Prema tome, delovanje operatora $\hat{\mathbf{r}}$ na stanje opisano vektorom $|\psi\rangle$ u koordinatnoj reprezentaciji svodi se na množenje $\mathbf{r}\psi(\mathbf{r})$, dakle

$$\hat{\mathbf{r}}|\psi\rangle \;\to\; \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{r}}|\psi\rangle = \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}). \tag{8.44}$$

Da bismo odredili jezgro integralnog operatora za impuls u koordinatnoj reprezentaciji, iskoristićemo formulu (7.25). Promenljivu po kojoj se vrši integracija ovde ćemo označiti sa $\mathbf{r}'$, a zatim celu jednakost skalarno pomnožiti sa leve strane sa $|\mathbf{r}\rangle$. Sledi

$$\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = \int (-i\hbar\nabla'\langle \mathbf{r}'|\psi\rangle)\,\langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}', \tag{8.45}$$

gde je $\nabla'$ nabla operator sa parcijalnim izvodima po komponentama vektora $\mathbf{r}'$. Koristeći relaciju zatvorenosti skupa $\{|\mathbf{r}\rangle\}$, izraz na levoj strani jednakosti (8.45) može se napisati u obliku $\int\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|\psi\rangle\mathrm{d}^3\mathbf{r}'$, tako da, uz smenu $\langle \mathbf{r}'|\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}')$ i uz uslov ortonormiranosti (7.19), ova jednakost postaje

$$\int \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{r}'\rangle\psi(\mathbf{r}')\mathrm{d}^3\mathbf{r}' = \int \left[-i\hbar\nabla'\psi(\mathbf{r}')\right]\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}'. \tag{8.46}$$

Prema tome, jezgro integralnog operatora za impuls u koordinatnoj reprezentaciji ima oblik

$$\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{r}'\rangle = -i\hbar\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\nabla, \tag{8.47}$$

a delovanje operatora $\hat{\mathbf{p}}$ na vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_o$ u toj reprezentaciji predstavljeno je izrazom $\int\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{r}'\rangle\psi(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}' = -i\hbar\int\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\nabla\psi(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}' = -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r})$, dakle

$$\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle \;\to\; \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}). \tag{8.48}$$

Ovde smo videli da se integralni operatori za koordinatu i impuls u koordinatnoj reprezentaciji svode na *multiplikativni* operator $\mathbf{r}$, odnosno *diferencijalni* operator $-i\hbar\nabla$, zahvaljujući proporcionalnosti odgovarajućih jezgara delta funkciji (izrazi (8.43) i (8.47)). Pokazuje se da to važi i za druge fizičke veličine, pa se u talasnoj mehanici, umesto integralnih operatora, pojavljuju upravo te dve klase operatora.

### 8.2.3 Šredingerova jednačina u koordinatnoj reprezentaciji

Šredingerova jednačina detaljno je razmatrana u četvrtoj glavi (prvi deo kursa) u formalizmu talasne mehanike, a zatim navedena kao VII postulat (odeljak 6.3.7) u okviru opšteg formalizma kvantne mehanike. U nastavku ćemo na primeru čestice u skalarnom potencijalu pokazati da forma Šredingerove jednačine u talasnoj mehanici predstavlja koordinatnu reprezentaciju odgovarajuće jednačine iz opšteg formalizma.

Šredingerova jednačina za česticu mase $m$ u potencijalu $V(\mathbf{r})$ u opštem formalizmu kvantne mehanike glasi

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2|\psi(t)\rangle + V(\hat{\mathbf{r}})|\psi(t)\rangle. \tag{8.49}$$

Ako obe strane ove jednačine pomnožimo skalarno sleva vektorom $|\mathbf{r}\rangle$, uz smenu $\langle\mathbf{r}|\psi(t)\rangle = \psi(\mathbf{r},t)$, imamo

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \frac{1}{2m}\langle\mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}^2|\psi(t)\rangle + \langle\mathbf{r}|V(\hat{\mathbf{r}})|\psi(t)\rangle. \tag{8.50}$$

Da bismo prvi član na desnoj strani jednačine takođe doveli na oblik u kome operator deluje na talasnu funkciju, iskoristićemo formulu

$$\hat{\mathbf{p}}^2|\psi\rangle = \int(-\hbar^2\nabla^2\langle\mathbf{r}|\psi\rangle)|\mathbf{r}\rangle\mathrm{d}^3\mathbf{r}, \tag{8.51}$$

koja se dobija iz formule (7.25) njenom uzastopnom primenom. Ako u poslednjoj formuli promenljivu po kojoj se vrši integracija označimo sa $\mathbf{r}'$, a zatim celu jednakost pomnožimo skalarno sa leve strane vektorom $|\mathbf{r}\rangle$, koristeći ortonormiranost svojstvenih vektora koordinate ($\langle\mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$), dobijamo

$$\langle\mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}^2|\psi\rangle = \int(-\hbar^2\nabla'^2\langle\mathbf{r}'|\psi\rangle)\langle\mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle\mathrm{d}^3\mathbf{r}' = -\hbar^2\nabla^2\psi(\mathbf{r}) \equiv -\hbar^2\Delta\psi(\mathbf{r}). \tag{8.52}$$

Pretpostavićemo dalje da se potencijal $V(\mathbf{r}) \equiv V(x,y,z)$ može razviti u stepeni red oblika $\sum_{l,m,n} v_{lmn}\, x^l y^m z^n$, na osnovu čega operator potencijalne energije možemo predstaviti u obliku $V(\hat{\mathbf{r}}) = \sum_{l,m,n} v_{lmn}\, \hat{x}^l\hat{y}^m\hat{z}^n$. Tada je delovanje ovog operatora na svojstveni vektor operatora koordinate

$$\begin{aligned} V(\hat{\mathbf{r}})|\mathbf{r}\rangle &= \sum_{l,m,n} v_{lmn}\hat{x}^l\hat{y}^m\hat{z}^n|x\rangle|y\rangle|z\rangle \\ &= \sum_{l,m,n} v_{lmn}x^l y^m z^n|x\rangle|y\rangle|z\rangle = V(\mathbf{r})|\mathbf{r}\rangle. \end{aligned} \tag{8.53}$$

Ermitskom konjugacijom poslednjeg i krajnjeg izraza u gornjem izvođenju dolazimo do jednakosti $\langle\mathbf{r}|V(\hat{\mathbf{r}}) = V(\mathbf{r})\langle\mathbf{r}|$, iz koje skalarnim množenjem obe njene strane vektorom $|\mathbf{r}'\rangle$, odnosno vektorom $|\psi(t)\rangle$, dobijamo

$$\langle\mathbf{r}|V(\hat{\mathbf{r}})|\mathbf{r}'\rangle = V(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{8.54}$$

i

$$\langle \mathbf{r}|V(\hat{\mathbf{r}})|\psi\rangle = V(\mathbf{r})\langle \mathbf{r}|\psi(t)\rangle = V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t). \tag{8.55}$$

Izraz (8.54) predstavlja jezgro operatora potencijalne energije $V(\hat{\mathbf{r}})$ u koordinatnoj reprezentaciji. Vidimo da je ono, kao što je navedeno na kraju prethodnog odeljka, proporcionalno delta funkciji, a da je $V(\hat{\mathbf{r}})$ u koordinatnoj reprezentaciji multiplikativan operator $V(\mathbf{r})$, što je i očekivano za funkcije operatora koordinate.

Konačno, zamenjujući rezultate (8.52) i (8.55) u jednačinu (8.50), dobijamo Šredingerovu jednačinu za česticu u potencijalu $V(\mathbf{r})$ u koordinatnoj reprezentaciji

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}), \tag{8.56}$$

koja se podudara sa jednačinom (4.14) u talasnoj mehanici.

## 8.3 Impulsna reprezentacija

Reprezentacija definisana vektorskim operatorom $\hat{\mathbf{p}}$ naziva se *impulsna reprezentacija* u orbitnom prostoru stanja čestice ili $\mathbf{p}$-reprezentacija. U nastavku ćemo videti da, ako kretanje čestice nije ograničeno, ovaj operator, kao i operator koordinate, ima čisto neprekidan spektar i, prema tome, spada u neprekidne reprezentacije[4].

### 8.3.1 Svojstveni bazis operatora impulsa u prostoru $\mathcal{H}_o$

U poglavlju 6.4 videli smo da sve osobine operatora koordinate slede iz komutacionih relacija $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$. Ove relacije se, međutim, mogu napisati i u obliku $[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = -i\hbar\delta_{ij}$, što znači da u opštem formalizmu komponente $\hat{x}_i$ i $\hat{p}_i$ igraju, do na znak imaginarne jedinice, simetrične uloge. Prema tome, za sve izraze koji su izvedeni za koordinatu postoje analogni izrazi za impuls, pri čemu se ovi drugi neposredno dobijaju iz prvih transformacijama $x_i \rightleftarrows p_i$, $i \to -i$.

Na osnovu pomenute analogije sa koordinatom, komponente $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ operatora impulsa $\hat{\mathbf{p}}$, pošto su u pitanju kompatibilne opservable, imaju zajedničke svojstvene vektore $|\mathbf{p}\rangle = |p_x\rangle|p_y\rangle|p_z\rangle$, gde su $|p_x\rangle$, $|p_y\rangle$, $|p_z\rangle$ svojstveni vektori te tri opservable koji odgovaraju svojstvenim vrednostima $p_x, p_y, p_z \in (-\infty, +\infty)$. Njihov zajednički svojstveni problem, $\hat{p}_x|\mathbf{p}\rangle = p_x|\mathbf{p}\rangle$, $\hat{p}_y|\mathbf{p}\rangle = p_y|\mathbf{r}\rangle$, $\hat{p}_z|\mathbf{p}\rangle = p_z|\mathbf{r}\rangle$, pišemo u obliku

$$\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle, \tag{8.57}$$

a skup vektora $|\mathbf{p}\rangle$, $\forall\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3$, čini svojstveni bazis vektorskog operatora $\hat{\mathbf{p}}$ u $\mathcal{H}_o$. Dalje, po analogiji sa izrazom (7.18), svi svojstveni vektori operatora impulsa mogu se izraziti preko jednog od njih, npr.

$$|\mathbf{p}\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\hat{\mathbf{r}}}|\mathbf{p}=\mathbf{0}\rangle. \tag{8.58}$$

[4]Ukoliko je kretanje čestice ograničeno, operator impulsa ima diskretan spektar (v. odeljak 3.1.6), te je i odgovarajuća reprezentacija diskretna.

Prema tome, kao i u slučaju operatora koordinate, spektar operatora $\hat{\mathbf{p}}$ je *neprekidan* (čine ga svi vektori impulsa $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3$) i *nedegenerisan* (zbog kompletnosti skupa opservabli $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_y$). Relacije ortonormiranosti i zatvorenosti u ovom slučaju glase

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \tag{8.59}$$

odnosno

$$\int |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}| \, \mathrm{d}^3\mathbf{p} = \hat{I}, \tag{8.60}$$

a vektori orbitnog prostora stanja čestice $\mathcal{H}_o$ mogu se predstaviti u obliku

$$|\psi\rangle = \int \langle \mathbf{p}|\psi\rangle |\mathbf{p}\rangle \, \mathrm{d}^3\mathbf{p}, \tag{8.61}$$

za koji važi uslov *kvadratne integrabilnosti* $\int |\langle \mathbf{p}|\psi\rangle|^2 \mathrm{d}^3\mathbf{p} < +\infty$.

## 8.3.2 Reprezentovanje stanja

Razvoj (8.61) proizvoljnog stanja $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_o$ po svojstvenom bazisu operatora impulsa možemo prepisati u obliku

$$|\psi\rangle = \int \psi(\mathbf{p}) |\mathbf{p}\rangle \mathrm{d}^3\mathbf{p}, \tag{8.62}$$

gde su $\psi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p}|\psi\rangle$ odgovarajući Furijeovi koeficijenti. Neprekidni skup ovih koeficijenata predstavlja *funkciju stanja (talasnu funkciju) u impulsnoj reprezentaciji*. Dakle

$$|\psi\rangle \;\rightarrow\; \psi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p}|\psi\rangle. \tag{8.63}$$

Skalarni proizvod vektora $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}_o$ u impulsnoj reprezentaciji glasi

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\hat{I}|\phi\rangle = \int \langle\psi|\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|\phi\rangle \mathrm{d}^3\mathbf{p} = \int \psi^*(\mathbf{p})\phi(\mathbf{p}) \mathrm{d}^3\mathbf{p}, \tag{8.64}$$

pri čemu je iskorištena relacija zatvorenosti (8.60). Iz ovog izraza i iz konačnosti norme vektora $|\psi\rangle$ sledi $\int |\psi(\mathbf{p})|^2 \mathrm{d}^3\mathbf{p} = \langle\psi|\psi\rangle < +\infty$, dakle funkcija $\psi(\mathbf{p})$ je kvadratno integrabilna.

Ako je funkcija stanja $\psi(\mathbf{p})$ normirana na jedinicu, na osnovu postulata o verovatnoći (slučaj neprekidnog spektra), sledi

$$|\psi(\mathbf{p})|^2 = |\langle \mathbf{p}|\psi\rangle|^2 = \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}(\mathbf{p})}{\mathrm{d}V_{\mathbf{p}}} \equiv \rho(\mathbf{p}), \tag{8.65}$$

gde je $\mathrm{d}V_{\mathbf{p}} \equiv \mathrm{d}^3\mathbf{p}$. Dakle, kvadrat modula funkcije $\psi(\mathbf{p})$ predstavlja gustinu verovatnoće (sada u impulsnom prostoru $V_{\mathbf{p}}$) da čestica ima vrednost impulsa $\mathbf{p}$.

Iz uslova ortonormiranosti (8.59) sledi da su svojstveni vektori operatora impulsa $\hat{\mathbf{p}}$ u impulsnoj reprezentaciji predstavljeni delta funkcijama

$$|\mathbf{p}'\rangle \rightarrow \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \tag{8.66}$$

### 8.3.3 Reprezentovanje operatora

Operator $\hat{A}$, koji deluje u orbitnom prostoru stanja čestice $\mathcal{H}_o$, u impulsnoj reprezentaciji predstavljen je jezgrom integralnog operatora

$$A(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \langle \mathbf{p}|\hat{A}|\mathbf{p}'\rangle, \tag{8.67}$$

a njegovo delovanje na vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_o$ predstavljeno je delovanjem integralnog operatora sa ovim jezgrom na funkciju stanja $\psi(\mathbf{p})$, dakle

$$\hat{A}|\psi\rangle \;\to\; \int A(\mathbf{p},\mathbf{p}')\psi(\mathbf{p}')\,\mathrm{d}^3\mathbf{p}'. \tag{8.68}$$

Izrazi za jezgro integralnog operatora za koordinatu i impuls u impulsnoj reprezentaciji dobijaju se iz izraza (8.47) i (8.43) uz pomoć transformacija $\mathbf{r} \rightleftarrows \mathbf{p}$, $i \to -i$ i glase

$$\langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{p}'\rangle = i\hbar\,\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\nabla_{\mathbf{p}}, \tag{8.69}$$

odnosno

$$\langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p}\,\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'), \tag{8.70}$$

pri čemu oznaka $\nabla_{\mathbf{p}}$ u prvom izrazu predstavlja nabla operator sa parcijalnim izvodima po komponentama impulsa.

Uzimajući za jezgro integralnog operatora prvo izraz (8.69), a zatim izraz (8.70), integral na desnoj strani relacije (8.68) svodi se u prvom slučaju na $i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{p})$, a u drugom na $\mathbf{p}\psi(\mathbf{p})$. Prema tome, delovanje operatora $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$ na stanje $|\psi\rangle$ u impulsnoj reprezentaciji predstavljeno je delovanjem *diferencijalnog operatora* $i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}$, odnosno *multiplikativnog operatora* $\mathbf{p}$, na funkciju stanja $\psi(\mathbf{p})$, dakle

$$\hat{\mathbf{r}}|\psi\rangle \;\to\; \langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{r}}|\psi\rangle = i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{p}), \tag{8.71}$$

$$\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle \;\to\; \langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = \mathbf{p}\psi(\mathbf{p}). \tag{8.72}$$

### 8.3.4 Prelazak sa koordinatne na impulsnu reprezentaciju

Talasna funkcija proizvoljnog stanja u impulsnoj reprezentaciji može se odrediti ako je poznata odgovarajuća talasna funkcija u koordinatnoj reprezentaciji. Naime

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{p}) &= \langle \mathbf{p}|\psi\rangle = \langle \mathbf{p}|\hat{I}|\psi\rangle = \langle \mathbf{p}|\left(\int |\mathbf{r}\rangle\langle \mathbf{r}|\mathrm{d}^3\mathbf{r}\right)|\psi\rangle = \int \langle \mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle\langle \mathbf{r}|\psi\rangle\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}\\ &= \int \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle^*\langle \mathbf{r}|\psi\rangle\,\mathrm{d}^3\mathbf{r} = \int \phi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3\mathbf{r},\end{aligned} \tag{8.73}$$

gde su $\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle$ svojstvene funkcije operatora $\hat{\mathbf{p}}$ u koordinatnoj reprezentaciji. Svojstveni problem ovog operatora, predstavljen jednačinom (8.57), u koordinatnoj reprezentaciji ima oblik

$$-i\hbar\nabla\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mathbf{p}\,\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}), \tag{8.74}$$

a njegova rešenja su ravni talasi koji, nakon normiranja na delta funkciju, glase (v. odeljke 3.4.3 i 3.4.8)

$$\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}. \tag{8.75}$$

Zamenjujući funkciju $\phi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ u krajnjem izrazu transformacije (8.73) kompleksno konjugovanom vrednošću izraza (8.75), transformacija uzima oblik

$$\psi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r})\, \mathrm{d}^3\mathbf{r}, \tag{8.76}$$

tj. svodi se na Furijeovu transformaciju talasne funkcije $\psi(\mathbf{r})$.

### 8.3.5 Šredingerova jednačina u impulsnoj reprezentaciji

Na kraju prethodnog poglavlja pokazali smo kako se, polazeći od Šredingerove jednačine za česticu u potencijalu $V(\mathbf{r})$, date u opštem formalizmu kvantne mehanike, dolazi do odgovarajuće jednačine u koordinatnoj reprezentaciji. Ovde ćemo odrediti tu jednačinu u impulsnoj reprezentaciji.

Kao prvi korak u tom cilju, obe strane jednačine (8.49) pomnožićemo skalarno sleva vektorom $|\mathbf{p}\rangle$. Dobijena jednačina, uz smenu $\langle \mathbf{p}|\psi(t)\rangle = \psi(\mathbf{p}, t)$, glasi

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{p},t)}{\partial t} = \frac{1}{2m}\langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{p}}^2|\psi(t)\rangle + \langle \mathbf{p}|V(\hat{\mathbf{r}})|\psi(t)\rangle. \tag{8.77}$$

Da bismo prvi član sa desne strane poslednje jednačine transformisali u oblik koji sadrži funkciju $\psi(\mathbf{p}, t)$, poći ćemo od rezultata $\hat{\mathbf{p}}^2|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}^2|\mathbf{p}\rangle$. Ermitskom konjugacijom ove jednakosti sledi $\langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{p}}^2 = \mathbf{p}^2\langle \mathbf{p}|$, što delovanjem na vektor stanja $|\psi(t)\rangle$ daje

$$\langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{p}}^2|\psi(t)\rangle = \mathbf{p}^2\psi(\mathbf{p}, t). \tag{8.78}$$

Da bismo transformisali i drugi član sa desne strane jednačine (8.77), uočimo da, uvodeći vektor $|\psi'(t)\rangle = V(\hat{\mathbf{r}})|\psi(t)\rangle$, izraz $\langle \mathbf{p}|V(\hat{\mathbf{r}})|\psi(t)\rangle$ možemo tretirati kao funkciju $\psi'(\mathbf{p}, t)$, koja je Furijeova transformacija funkcije $\psi'(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r}|V(\hat{\mathbf{r}})|\psi(t)\rangle$. Dakle

$$\langle \mathbf{p}|V(\hat{\mathbf{r}})|\psi(t)\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \langle \mathbf{r}|V(\hat{\mathbf{r}})|\psi(t)\rangle\, \mathrm{d}^3\mathbf{r}. \tag{8.79}$$

Koristeći rezultat (8.55), a zatim predstavljajući funkciju $\psi(\mathbf{r}, t)$ kao inverznu Furijeovu transformaciju funkcije $\psi(\mathbf{p}, t)$, dalje sledi

$$\langle \mathbf{p}|V(\hat{\mathbf{r}})|\psi(t)\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t)\, \mathrm{d}^3\mathbf{r} \tag{8.80}$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int\!\!\int e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{p}', t)\, \mathrm{d}^3\mathbf{p}'\, \mathrm{d}^3\mathbf{r}. \tag{8.81}$$

Konačno, zamenjujući poslednji rezultat i izraz (8.78) u jednačinu (8.77), dobijamo Šredingerovu jednačinu za česticu u potencijalu $V(\mathbf{r})$ u impulsnoj reprezentaciji

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{p},t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi(\mathbf{p}) + \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \bar{V}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\psi(\mathbf{p}',t)\mathrm{d}^3\mathbf{p}', \tag{8.82}$$

pri čemu je

$$\bar{V}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r})\mathrm{d}^3\mathbf{r} \tag{8.83}$$

Furijeova transformacija potencijala $V(\mathbf{r})$.

## 8.4 Energijska reprezentacija

Reprezentacija definisana hamiltonijanom kao kompletnom opservablom, odnosno hamiltonijanom dopunjenim do kompletnog skupa kompatibilnih opservabli, naziva se energijska ili $E$-reprezentacija. Ova reprezentacija posebno je pogodna ako je energijski spektar kvantnog sistema čisto diskretan. Ovde ćemo se ograničiti na taj slučaj.

### 8.4.1 Reprezentovanje stanja

Pretpostavimo radi jednostavnosti da je hamiltonijan $\hat{H}$ kompletna opservabla i da ima čisto diskretan spektar. Neka je $\{|E_n\rangle\}$ njegov svojstveni bazis, tj. skup svih vektora $|E_n\rangle$, koji, uz odgovarajuće svojstvene energije $E_n$, predstavljaju rešenja svojstvenog problema[5]

$$\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle. \tag{8.84}$$

Ako se svojstveni vektori normiraju na jedinicu, bazis je ortonormiran, a odgovarajuća relacija zatvorenosti glasi

$$\sum_n |E_n\rangle\langle E_n| = \hat{I}. \tag{8.85}$$

Proizvoljni vektor $|\psi\rangle$ iz prostora stanja $\mathcal{H}$ kvantnog sistema u ovom bazisu razvija se kao $|\psi\rangle = \sum_n\langle E_n|\psi\rangle|E_n\rangle$, a skup koeficijenata $\psi(E_n) = \langle E_n|\psi\rangle$, koji se obično zadaje u obliku matrice kolone, jeste njegova *energijska reprezentacija*, dakle

$$|\psi\rangle \to \begin{pmatrix}\langle E_1|\psi\rangle\\ \langle E_2|\psi\rangle\\ \vdots\end{pmatrix}. \tag{8.86}$$

Ako je vektor $|\psi\rangle$ normiran na jedinicu, kvadrat modula koeficijenta $\langle E_n|\psi\rangle$, na osnovu izraza (8.7), predstavlja verovatnoću da se merenjem energije sistema u stanju opisanom ovim vektorom dobije vrednost $E_n$.

[5] Ako hamiltonijan $\hat{H}$ nije kompletna opservabla, treba ga dopuniti do kompletnog skupa kompatibilnih opservabli i posmatrati njihov zajednički svojstveni problem. Zajednički svojstveni vektori tog skupa mogu se pisati u obliku $|E_n,\gamma\rangle$, gde $\gamma$ predstavlja skup svojstvenih vrednosti dopunskih opservabli.

Proizvoljno stanje u energijskoj reprezentaciji može se odrediti polazeći od odgovarajuće talasne funkcije u koordinatnoj reprezentaciji ukoliko su poznate svojstvene funkcije hamiltonijana $\varphi_{E_n}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|E_n\rangle$ u istoj reprezentaciji. Naime

$$\begin{aligned}\psi(E_n) &\equiv \langle E_n|\psi\rangle = \langle E_n|\hat{I}|\psi\rangle = \langle E_n|\left(\int |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}\right)|\psi\rangle \\ &= \int \langle E_n|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\psi\rangle\,\mathrm{d}^3\mathbf{r} = \int \varphi^*_{E_n}(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}.\end{aligned} \tag{8.87}$$

Analognim postupkom, koristeći relaciju zatvorenosti (8.85), dobija se inverzna transformacija $\psi(\mathbf{r}) = \sum_n \varphi_{E_n}(\mathbf{r})\,\psi(E_n)$.

Na sličan način stanje u energijskoj reprezentaciji može se izraziti preko odgovarajuće talasne funkcije u impulsnoj reprezentaciji i obratno.

### 8.4.2 Reprezentovanje operatora

Pod istom pretpostavkom kao na početku prethodnog odeljka, operator $\hat{A}$ koji deluje u prostoru stanja $\mathcal{H}$ biće u energijskoj reprezentaciji predstavljen matricom $\mathsf{A}$ čiji su elementi[6]

$$A_{nn'} = \langle E_n|\hat{A}|E_{n'}\rangle, \tag{8.88}$$

gde su $|E_n\rangle$ i $|E_{n'}\rangle$ svojstveni vektori hamiltonijana. Delovanje operatora $\hat{A}$ na proizvoljni vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ u energijskoj reprezentaciji svodi se na množenje matrice $\mathsf{A}$ i matrice kolone (8.86), dakle

$$\hat{A}|\psi\rangle \;\rightarrow\; \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \langle E_1|\psi\rangle \\ \langle E_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{8.89}$$

Zahavaljujući svojstvenoj jednačini (8.84), matrični elementi hamiltonijana u njegovom svojstvenom bazisu glase $H_{nn'} = \langle E_n|\hat{H}|E_{n'}\rangle = E_{n'}\langle E_n|E_{n'}\rangle = E_n\delta_{nn'}$, što znači da je hamiltonijan u energijskoj reprezentaciji predstavljen dijagonalnom matricom

$$\hat{H} \;\rightarrow\; \mathsf{H} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & \cdots \\ 0 & E_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{8.90}$$

### 8.4.3 *N*-reprezentacija

Od posebnog značaja je energijska reprezentacija u svojstvenom bazisu hamiltonijana linearnog harmonijskog oscilatora, odnosno operatora $\hat{N}$ (v. odeljak 7.2.1), koja se iz tog razloga naziva reprezentacija kvantnih brojeva ili $N$-reprezentacija.

[6] Formulacija kvantne mehanike u (diskretnoj) energijskoj reprezentaciji naziva se matrična mehanika i vezuje se za ime Vernera Hajzenberga.

Pomenuti svojstveni bazis čine vektori (7.53). Koristeći relacije (7.54), (7.51) i (7.52), matrični elementi operatora $\hat{N}$, $\hat{a}$ i $\hat{a}^+$ u ovom bazisu glase $\langle n|\hat{N}|n'\rangle = n\delta_{nn'}$, $\langle n|\hat{a}|n'\rangle = \sqrt{n'}\,\delta_{n,n'-1}$ i $\langle n|\hat{a}^+|n'\rangle = \sqrt{n'+1}\,\delta_{n,n'+1}$. Prema tome, operator $\hat{N}$ se reprezentuje dijagonalnom matricom

$$\hat{N} \;\rightarrow\; \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \tag{8.91}$$

dok matrice koje reprezentuju operatore $\hat{a}$ i $\hat{a}^+$ imaju nenulte elemente na dijagonali koja se nalazi neposredno iznad, odnosno ispod glavne dijagonale, tj.

$$\hat{a} \;\rightarrow\; \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \tag{8.92}$$

$$\hat{a}^+ \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{8.93}$$

Pošto se sve opservable kvantnog sistema mogu predstaviti kao funkcije operatora $\hat{a}$ i $\hat{a}^+$, koristeći matrice (8.92) i (8.93) nije teško formirati matrice koje predstavljaju te opservable u $N$-reprezentaciji. Tako, na osnovu izraza (7.67) i (7.68) sledi

$$\hat{x} \;\rightarrow\; \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \tag{8.94}$$

$$\hat{p}_x \;\rightarrow\; i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{8.95}$$

Ovo poglavlje završavamo osvrtom na kraj prethodne glave, gde je pokazano da je formalizam zasnovan na primeni operatora anihilacije i kreacije takođe veoma pogodan za opis sistema identičnih čestica. U tom slučaju operator $\hat{N}$ igra ulogu operatora broja čestica u datom jednočestičnom stanju, pa se $N$-reprezentacija tada naziva *reprezentacija broja popunjenosti*.

# 9 Prostorno-vremenske transformacije

## 9.1 Transformacije i simetrije

### 9.1.1 Prostorno-vremenske transformacije u klasičnoj mehanici

Jedan od osnovnih principa Njutnove mehanike, poznat kao Galilejev princip relativnosti, kaže da su fizički zakoni isti u svakom inercijalnom referentnom sistemu. U takvom referentnom sistemu, ako na telo ne deluje sila, ono se kreće pravolinijski konstantnom brzinom, uključujući i mirovanje kao specijalni slučaj. Inercijalnih sistema ima neprebrojivo mnogo i sa jednog na drugi prelazi se tzv. *Galilejevim transformacijama* u koje spadaju prostorne rotacije, prostorne translacije, vremenske translacije i specijalne Galilejeve transformacije (tzv. bustovi). Galilejeve transformacije preslikavaju vektor položaja $\mathbf{r}$, vremenski trenutak $t$ i impuls $\mathbf{p}$ klasične čestice mase $m$ kao

$$\mathbf{r} \to \mathbf{r}' = \mathsf{R}\mathbf{r} + \mathbf{a} - \mathbf{v}t, \quad t \to t' = t + b, \quad \mathbf{p} \to \mathbf{p}' = \mathsf{R}\mathbf{p} - m\mathbf{v}, \tag{9.1}$$

gde je $\mathsf{R}$ matrica rotacije, $\mathbf{a}$ je vektor prostorne translacije, $b$ vremenska translacija i $\mathbf{v}$ vektor brzine.

Skup svih Galilejevih transformacija ima strukturu grupe (v. odeljak 2.1.1) i naziva se *Galilejeva grupa*. Pošto je u pitanju neprebrojiv skup, Galilejeva grupa spada u neprekidne grupe. Za razliku od diskretnih grupa, čije elemente možemo prebrojavati nekim indeksom, kod neprekidnih grupa tu ulogu ima jedan ili više neprekidnih parametara. Za fiziku su od posebnog značaja *Lijeve grupe* (Marius Sophus Lie). To su neprekidne grupe čiji elementi mogu biti okarakterisani konačnim brojem parametara, pri čemu su parametri elemenata dobijenih grupnim množenjem ili invertovanjem ostalih elemenata grupe analitičke funkcije parametara tih drugih elemenata[1]. Upravo je Galilejeva grupa primer Lijeve grupe, gde parametri matrice rotacije $\mathsf{R}$ (v. odeljak 9.2.4), vektori $\mathbf{a}$ i $\mathbf{v}$, te parametar $b$, predstavljaju Lijeve parametre.

Četiri vrste transformacija koje spadaju u Galilejeve transformacije takođe formiraju zasebne Lijeve grupe: rotacionu grupu R(3), grupu prostornih translacija $\mathrm{T}_3$, grupu vremenskih translacija $\mathrm{T}_1$ i grupu specijalnih Galilejevih transformacija $\mathrm{T}_3^{(v)}$, koje su četiri osnovne podgrupe Galilejeve grupe. Osim ovih podgrupa, od značaja je i Euklidova grupa E(3), čiji su elementi sve rotacije i sve prostorne translacije.

[1] Lijeve grupe su obrađene u udžbeniku „Matematička fizika 3” S. R. Ignjatovića (bibl. ref. II.B.2).

Pored Galilejevih transformacija, koje su neprekidne, za fiziku su važne i diskretne prostorno-vremenske transformacije. To su *prostorna inverzija*, koja je definisana transformacijama

$$\mathbf{r} \to \mathbf{r}' = -\mathbf{r}, \quad t \to t' = t, \quad \mathbf{p} \to \mathbf{p}' = -\mathbf{p} \tag{9.2}$$

i *vremenska inverzija*, definisana transformacijama

$$\mathbf{r} \to \mathbf{r}' = \mathbf{r}, \quad t \to t' = -t, \quad \mathbf{p} \to \mathbf{p}' = -\mathbf{p}. \tag{9.3}$$

Skup koji, pored Galilejevih transformacija, uključuje i prostornu i vremensku inverziju čini tzv. *proširenu Galilejevu grupu.*

Ovde je važno reći da navedene prostorno-vremenske transformacije (i neprekidne i diskretne) spadaju u *kanonske transformacije*[2], koje imaju poseban značaj u klasičnoj mehanici. Ova činjenica je, takođe, bitna i za prelazak na kvantnomehanički opis, što ćemo videti u nastavku.

Na kraju treba ukazati da se prostorno-vremenske transformacije mogu realizovati kao *aktivne* ili *pasivne*. U slučaju aktivne transformacije uzima se da su koordinatni sistem i početni vremenski trenutak fiksirani, a da se transformacija dešava na fizičkom sistemu u objektivnom prostoru i vremenu. Suprotno tome, kod pasivne transformacije uzima se da se sa fizičkim sistemom ništa ne dešava, a da se transformacijom prelazi iz jednog koordinatnog sistema u drugi ili se pomera početni trenutak vremena[3]. Pri tome, ista će pojava nakon pasivne transformacije za posmatrača izgledati isto kao nakon aktivne transformacije ukoliko su ove transformacije međusobno inverzne. Npr. ako se početak koordinatnog sistema pomeri za $-\mathbf{a}$ (pasivna transformacija), položaj nekog tela meren u odnosu na pomereni koordinatni sistem biće isti kao položaj tela koje je stvarno pomereno za $\mathbf{a}$ (aktivna transformacija), meren u odnosu na nepromenjeni koordinatni sistem[4]. Pomenimo još da su moguće dve aktivne interpretacije vremenskih translacija – *spontana* i *nespontana*. U prvom slučaju radi se o spontanoj evoluciji svakog fizičkog sistema u toku vremena, na šta nemamo uticaja, dok se u drugom slučaju, po analogiji sa prostornim translacijama, vrši (zamišljena) vremenska translacija na vremenskoj osi za izabrani vremenski pomeraj $b$.

### 9.1.2 Simetrije i integrali kretanja

*Simetrija* fizičkog sistema predstavlja invarijantnost tog sistema pod određenom vrstom transformacija. Skup svih transformacija pod kojim je sistem invarijantan obično ima strukturu grupe (kao što smo videli u slučaju Galilejevih transformacija) i naziva

---

[2] Kanonske transformacije predstavljaju transformacije kanonskih promenljivih (koordinata i njima konjugovanih impulsa) pod kojima su Hamiltonove jednačine invarijantne (v. npr. „Uvod u teorijsku fiziku, I deo, Teorijska mehanika" Đ. Mušickog, bibl. ref. II.C.2).

[3] Ako se npr. Galilejevim transformacijama prelazi iz jednog inercijalnog sistema u drugi (v. početak odeljka), onda su te transformacije pasivne. Međutim, ako one preslikavaju položaj, vremenski trenutak i impuls čestice, kako je rečeno pri navođenju relacija (9.1), onda se radi o aktivnim transformacijama.

[4] Odnos između aktivne i pasivne transformacije predstavljen je kroz nekoliko ilustrativnih primera u knjizi „Matematički metodi fizike" Metjuza i Vokera (J. Mathews, R. L. Walker, bibl. ref. II.B.3), str. 451.

se *grupa simetrije*. Simetrije fizičkog sistema u fundamentalnom su odnosu sa zakonima održanja. O tome govori teorema Emi Neter (Emmi Noether) koja se može formulisati na sledeći način: Svakoj neprekidnoj transformaciji pod kojom je Hamiltonovo dejstvo fizičkog sistema invarijantno odgovara jedan integral (konstanta) kretanja. Tako iz homogenosti i izotropnosti prostora proizilaze zakoni održanja impulsa i momenta impulsa, a iz homogenosti vremena zakon održanja energije. Postojanje integrala kretanja redukuje broj promenljivih u jednačinama koje opisuju sistem, tako da je nekad moguće njihovo potpuno razdvajanje i svođenje na nekoliko nezavisnih problema sa jednim stepenom slobode. Ovo važi kako u klasičnom tako i u kvantnomehaničkom opisu. Primer za to je rešavanje vremenski nezavisne Šredingerove jednačine atoma sa jednim elektronom, gde se, zahvaljujući sfernoj simetriji sistema, jednačina razlaže na tri jednačine sa po jednom nepoznatom (v. petu glavu). S druge strane, treba reći da u kvantnoj fizici cilj proučavanja simetrija nije isključivo jednostavniji opis i tehnika rešavanja problema već i fundamentalna pitanja koja se odnose na tzv. unutrašnje stepene slobode kvantnog sistema koji nemaju klasični analogon (spin, simetrije vezane za strukturu elementarnih čestica itd.). U ovoj glavi ćemo se, međutim, ograničiti na simetrije koje su prisutne i u klasičnom i u kvantnom opisu fizičkog sistema i odnose se na prostorno-vremenske transformacije.

U klasičnoj mehanici integrali kretanja najkonciznije su definisani pomoću Puasonovih zagrada (v. izraz (6.70)). Fizička veličina $A$ je konstanta kretanja ako je njena Puasonova zagrada sa Hamiltonovom funkcijom jednaka nuli, tj. $\{A, H\} = 0$. Važna osobina Puasonovih zagrada jeste ta da su one invarijantne pod kanonskim transformacijama. Dirak je pokazao da se veza između klasične i kvantne mehanike može uspostaviti tako da se Puasonovim zagradama pridruže komutatori, što je suština kanonske kvantizacije (odeljak 6.3.6). Na osnovu ove korespondencije, integrali kretanja u kvantnoj mehanici su one fizičke veličine čiji operatori komutiraju sa hamiltonijanom, dakle $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$[5]. Odavde sledi da su svojstvena stanja integrala kretanja stacionarna i da odgovarajući kvantni brojevi imaju potpuno određene i konstantne vrednosti, zbog čega se nazivaju „dobri kvantni brojevi".

### 9.1.3 Reprezentacije grupe simetrije. Operatori transformacija u prostoru stanja kvantnog sistema

U prethodnom odeljku grupu simetrije fizičkog sistema definisali smo kao skup svih transformacija određene vrste pod kojima je sistem invarijantan. Ako delovanje tih transformacija posmatramo u određenom vektorskom prostoru, pri čemu je algebarska struktura grupe očuvana, onda govorimo o određenoj *reprezentaciji* grupe simetrije. Tako su prostorno-vremenske transformacije u klasičnoj mehanici prirodno definisane u faznom prostoru fizičkog sistema (relacije (9.1)-(9.3)), dok u kvantnoj mehanici posmatramo odgovarajuće transformacije stanja u Hilbertovom prostoru.

[5]Ovaj zaključak smo izveli u prvom delu kursa analizirajući promenu srednje vrednosti fizičke veličine sa vremenom (odeljak 4.2.3).

Transformacije (9.1)-(9.3), kao što smo naveli, pripadaju klasi kanonskih transformacija. Postavlja se pitanje koja vrsta transformacija u kvantnoj mehanici odgovara kanonskim transformacijama. Ako se od transformacija koje čine grupu simetrije zahteva da ne menjaju fizičke zakone, onda se u kvantnoj mehanici očekuje da pod njima bude invarijantna, pre svega, verovatnoća prelaza. Ove transformacije ćemo u prostoru stanja kvantnog sistema predstaviti operatorima $\hat{U}(\alpha)$, gde je $\alpha$ Lijev parametar ili skup parametara. Neka operator $\hat{U}(\alpha)$ (za neko izabrano $\alpha$) preslikava stanje $|\phi\rangle$ u stanje $|\phi'\rangle$, a stanje $|\psi\rangle$ u stanje $|\psi'\rangle$, tj.

$$\hat{U}(\alpha)|\phi\rangle = |\phi'\rangle, \quad \hat{U}(\alpha)|\psi\rangle = |\psi'\rangle. \tag{9.4}$$

Verovatnoće prelaza iz stanja $|\phi\rangle$ u stanje $|\psi\rangle$ i iz stanja $|\phi'\rangle$ u stanje $|\psi'\rangle$ date su izrazima $\mathcal{P}(|\phi\rangle \to |\psi\rangle) = |\langle\phi|\psi\rangle|^2$ i $\mathcal{P}(|\phi'\rangle \to |\psi'\rangle) = |\langle\phi'|\psi'\rangle|^2$, pri čemu se podrazumeva da su sva stanja normirana (v. odeljak 6.3.5). Prema tome, uslov održanja verovatnoće prelaza

$$\mathcal{P}(|\phi\rangle \to |\psi\rangle) = \mathcal{P}(|\phi'\rangle \to |\psi'\rangle) \tag{9.5}$$

eksplicitno glasi

$$|\langle\phi'|\psi'\rangle|^2 = |\langle\phi|\psi\rangle|^2, \tag{9.6}$$

što se, koristeći transformacije (9.4), dalje može napisati u obliku

$$|\langle\phi|\hat{U}^+(\alpha)\hat{U}(\alpha)|\psi\rangle|^2 = |\langle\phi|\psi\rangle|^2. \tag{9.7}$$

Operatori $\hat{U}(\alpha)$ koji zadovoljavaju ovaj uslov su ili unitarni ili antiunitarni. Naime, relacija (2.63), kojom je definisan *unitarni* operator $\hat{U}$ (v. odeljak 2.2.3), u Dirakovoj notaciji ima oblik

$$\langle\phi|\hat{U}^+\hat{U}|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle, \tag{9.8}$$

dok je *antiunitarni* (antilinearni unitarni) operator $\hat{U}_a$ definisan relacijom

$$\langle\phi|\hat{U}_a^+\hat{U}_a|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*. \tag{9.9}$$

Uočimo da se obe relacije, uzimajući kvadrat modula njihove leve i desne strane, svode na uslov (9.7)[6]. Navedimo ovde da se svaki antiunitarni operator može predstaviti kao proizvod (tj. uzastopno delovanje) nekog unitarnog operatora i operacije kompleksnog konjugovanja.

Pokazuje se da u kvantnoj mehanici većina transformacija od fizičkog značaja, kao što su Galilejeve transformacije, spada u unitarne transformacije. Tu spada i prostorna inverzija, dok je vremenska inverzija antiunitarna transformacija. U okviru ovog kursa proučićemo prostornu inverziju, prostorne translacije i rotacije, te vremenske translacije, što znači da ćemo se u nastavku ograničiti na unitarne transformacije.

[6] Strožije izvođenje zaključka o (anti)unitarnosti transformacija u prostoru stanja $\mathcal{H}$ koje odgovaraju kanonskim transformacijama polazi od toga da poslednjim transformacijama u kvantnoj mehanici zapravo odgovaraju transformacije u prostoru svih pravaca (engl. *ray space*) u $\mathcal{H}$ koje čuvaju verovatnoću prelaza, odnosno kvadrat apsolutne vrednosti skalarnog proizvoda normiranih vektora koji pripadaju tim pravcima. Vignerova teorema o simetrijama (Eugene Wigner) dalje kaže da svaka transformacija prostora pravaca koja čuva apsolutnu vrednost skalarnog proizvoda može biti predstavljena unitarnom ili antiunitarnom transformacijom Hilbertovog prostora (ovde je to $\mathcal{H}$), pri čemu su operatori transformacija određeni do na proizvoljni fazni faktor.

### 9.1.4 Unitarne transformacije

Polazeći od definicije unitarnog operatora (relacija (2.63), odnosno (9.8)) možemo reći da *unitarna transformacija* predstavlja linearno preslikavanje vektorskog prostora koje čuva skalarni proizvod. To preslikavanje može da bude u isti ili u neki izomorfni vektorski prostor. Alternativne definicije koje slede iz relacije (9.8) su $\hat{U}^+\hat{U} = \hat{I}$, odnosno $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$ (v. relacije (2.64) i (2.65)).

Posledice očuvanja skalarnog proizvoda pod unitarnim transformacijama su očuvanje norme vektora, kao i „ugla" među vektorima. Prema tome, ortonormirani bazis u datom vektorskom prostoru preslikava se unitarnom transformacijom u skup vektora koji je takođe jedan ortonormirani bazis u istom ili u izomorfnom prostoru.

Unitarnim transformacijama, pored elemenata vektorskog prostora, takođe se preslikavaju i operatori koji deluju u tom prostoru. Ako npr. linearni operator $\hat{A}$ delovanjem na vektor $|\phi\rangle$ daje vektor $|\psi\rangle$, a operator unitarne transformacije $\hat{U}$ preslikava ova dva vektora u vektore $|\phi'\rangle$ i $|\psi'\rangle$, imamo

$$|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle = \hat{U}\hat{A}|\phi\rangle = \hat{U}\hat{A}\hat{I}|\phi\rangle = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1}\hat{U}|\phi\rangle = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1}|\phi'\rangle. \tag{9.10}$$

Posmatrajući levi i desni krajnji izraz možemo reći da operator

$$\hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1} \equiv \hat{U}\hat{A}\hat{U}^+ \tag{9.11}$$

prevodi vektor $|\phi'\rangle$ u vektor $|\psi'\rangle$ i, prema tome, predstavlja unitarnu transformaciju operatora $\hat{A}$.

Pokazuje se da se unitarni operatori koji reprezentuju transformacije iz Galilejeve grupe mogu predstaviti u eksponencijalnom obliku

$$\hat{U}(\ldots,\alpha_i,\ldots) = e^{-i\sum_i \alpha_i\hat{\Gamma}_i}, \tag{9.12}$$

gde su $\alpha_i$ Lijevi parametri, a $\hat{\Gamma}_i$ ermitski operatori koji se nazivaju *generatori grupe*[7]. Generatori određuju delovanje operatora transformacija u okolini jedinice, tj. kada $\alpha_i = \varepsilon_i \to 0$. Relacija (9.12) tada postaje

$$\hat{U}(\ldots,\varepsilon_i\ldots) = \hat{I} - i\sum_i \varepsilon_i\hat{\Gamma}_i. \tag{9.13}$$

Skup svih generatora Lijeve grupe i njihove međusobne relacije čine tzv. *Lijevu algebru* odgovarajuće grupe simetrije. Uočimo da generatore nije moguće definisati za diskretne transformacije tako da se odgovarajući unitarni operatori ne mogu predstaviti u eksponencijalnom obliku.

Napomenimo da, pored transformacija koje odgovaraju prostornim i vremenskim simetrijama, najznačajnije unitarne transformacije u kvantnoj mehanici su transformacije među različitim reprezentacijama (v. odeljak 8.1.5), koje smo već proučili.

[7] Stounova teorema (Marshall Stone) uspostavlja jednoznačnu korespondenciju između neprekidne jednoparametarske unitarne transformacije $\hat{U}(\alpha)$ u Hilbertovom prostoru i ermitskog operatora $\hat{\Gamma}$, koja je oblika $\hat{U}(\alpha) = \exp\{-i\alpha\hat{\Gamma}\}$. Teorema se može direktno primeniti na grupu $T_1$, koja je jednoparametarska, ali i na grupe $T_3$ i $T_3^{(v)}$, koje su troparametarske, pošto se njihovi elementi mogu napisati u obliku proizvoda jednoparametarskih eksponencijalnih faktora. Pokazuje se da ovo važi i za grupu R(3), ali zbog nekomutiranja generatora ove grupe to svođenje nije trivijalno.

### 9.1.5 Invarijantnost opservabilnih veličina pod unitarnim transformacijama

Kao što smo videli u odeljku 9.1.3, unitarne transformacije čuvaju verovatnoću prelaza. Međutim, pod njima su takođe invarijantne sve opservabilne veličine u kvantnoj mehanici i izrazi koji se koriste pri njihovom računanju. Pokazaćemo npr. da se unitarnim transformacijama ermitski operatori prevode u ermitske operatore i da se pri tome ne menjaju njihove svojstvene vrednosti, matrični elementi i determinanta, kao i da se komutacione relacije koje važe među operatorima različitih fizičkih veličina pod ovim transformacijama održavaju.

(i) Neka je $\hat{A}$ ermitski operator i neka je $\hat{A}'$ operator dobijen unitarnom transformacijom $\hat{U}$ operatora $\hat{A}$, dakle $\hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^+$. Koristeći pravila ermitske konjugacije (odeljak 6.2.3), imamo

$$(\hat{A}')^+ = (\hat{U}\hat{A}\hat{U}^+)^+ = \hat{U}(\hat{U}\hat{A})^+ = \hat{U}\hat{A}^+\hat{U}^+ = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^+ = \hat{A}'. \tag{9.14}$$

Prema tome, operator $\hat{A}'$ takođe je ermitski.

(ii) Neka je $\{a\}$ skup svojstvenih vrednosti, a $\{|\psi_a\rangle\}$ skup odgovarajućih svojstvenih vektora ermitskog operatora $\hat{A}$. Delujući operatorom unitarne transformacije $\hat{U}$ na obe strane svojstvenog problema $\hat{A}\,|\psi_a\rangle = a\,|\psi_a\rangle$, leva strana jednakosti postaje $\hat{U}\hat{A}|\psi_a\rangle = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^+\hat{U}\,|\psi_a\rangle$, a desna $a\,\hat{U}|\psi_a\rangle$. Prema tome, imamo

$$\hat{A}'|\psi_a'\rangle = a\,|\psi_a'\rangle, \tag{9.15}$$

gde je $|\psi_a'\rangle = \hat{U}|\psi_a\rangle$, a operator $\hat{A}'$ dat je izrazom (9.11).

(iii) Neka je $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$ matrični element operatora $\hat{A}$ između vektora $|\phi\rangle$ i $|\psi\rangle$ i neka su $\hat{A}'$, $|\phi'\rangle$ i $|\psi'\rangle$ odgovarajući operator i vektori dobijeni unitarnom transformacijom $\hat{U}$. Tada je

$$\langle\phi'|\hat{A}'|\psi'\rangle = \langle\phi|\hat{U}^+(\hat{U}\hat{A}\hat{U}^+)\hat{U}\,|\psi\rangle = \langle\phi|(\hat{U}^+\hat{U})\hat{A}(\hat{U}^+\hat{U})|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle. \tag{9.16}$$

(iv) Koristeći osobinu da je determinanta proizvoda operatora jednaka proizvodu njihovih determinanti, sledi

$$\begin{aligned}\det\hat{A}' &= \det(\hat{U}\hat{A}\hat{U}^+) = \det\hat{U}\det\hat{A}\det\hat{U}^+ = \det\hat{U}\det\hat{U}^+\det\hat{A}\\ &= \det(\hat{U}\hat{U}^+)\det\hat{A} = \det\hat{I}\det\hat{A} = \det\hat{A}.\end{aligned} \tag{9.17}$$

(v) Pokazaćemo da se komutaciona relacija $[\hat{A},\hat{B}] = i\hat{C}$, koja važi za proizvoljna dva ermitska operatora $\hat{A}$ i $\hat{B}$, pri čemu je i $\hat{C}$ ermitski operator (v. relaciju (3.95) i dokaz), održava pod proizvoljnom unitarnom transformacijom $\hat{U}$. U tom cilju primenićemo transformaciju oblika (9.11) na obe strane komutacione relacije. Transformacija leve strane je

$$\begin{aligned}\hat{U}[\hat{A},\hat{B}]\hat{U}^+ &= \hat{U}\hat{A}\hat{B}\hat{U}^+ - \hat{U}\hat{B}\hat{A}\hat{U}^+ = \hat{U}\hat{A}\hat{I}\hat{B}\hat{U}^+ - \hat{U}\hat{B}\hat{I}\hat{A}\hat{U}^+\\ &= \hat{U}\hat{A}\hat{U}^+\hat{U}\hat{B}\hat{U}^+ - \hat{U}\hat{B}\hat{U}^+\hat{U}\hat{A}\hat{U}^+ = \hat{A}'\hat{B}' - \hat{B}'\hat{A}' = [\hat{A}',\hat{B}'].\end{aligned} \tag{9.18}$$

Desna strana relacije transformiše se u $i\hat{U}\hat{C}\hat{U}^+ = i\hat{C}'$, tako da cela komutaciona relacija nakon transformacije glasi $[\hat{A}',\hat{B}'] = i\hat{C}'$.

Ako se sada podsetimo da su u klasičnoj mehanici Puasonove zagrade invarijantne pod kanonskim transformacijama, a da ove zagrade kvantizacijom prelaze u komutatore koji su invarijantni pod unitarnim transformacijama, s pravom možemo reći da reprezentacije elemenata grupe simetrije u faznom prostoru, odnosno u prostoru kvantnih stanja sistema, jesu transformacije iz tih dvaju klasa, respektivno. Zahvaljujući osobinama (i)-(v), rešenja kvantnomehaničkih problema pre i nakon transformacija moraju biti ista, što omogućava izbor okvira za njihovo jednostavnije nalaženje.

## 9.2 Unitarne transformacije koje odgovaraju prostornim simetrijama

### 9.2.1 Promena stanja kvantnog sistema pri datoj prostornoj transformaciji

Pokazaćemo kako se prostorna transformacija, definisana u faznom (ili konfiguracionom) prostoru, prenosi u prostor stanja kvantnog sistema. Kao pogodan okvir za to prenošenje prirodno se nameće koordinatna reprezentacija, u kojoj su kvantna stanja predstavljena talasnim funkcijama koje zavise od skupa svih koordinata sistema. Razmotrimo, jednostavnosti radi, jednočestični sistem. Neka je kvantno stanje čestice predstavljeno vektorom $|\psi\rangle$, kome, prelaskom na koordinatnu reprezentaciju, pridružujemo talasnu funkciju $\psi(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\psi\rangle$. Posmatrajmo aktivnu prostornu transformaciju koja je u konfiguracionom prostoru sistema definisana operatorom $\mathsf{T}(\alpha)$. Ovaj operator svaku tačku $\mathbf{r}$ tog prostora preslikava u neku tačku $\mathbf{r}'$ iz istog prostora, tj.

$$\mathbf{r}' = \mathsf{T}(\alpha)\mathbf{r}. \tag{9.19}$$

Pošto je u pitanju aktivna transformacija, dakle transformacija izvršena na fizičkom sistemu, stanje sistema nakon te transformacije biće promenjeno. Neka je novo stanje sistema predstavljeno vektorom $|\psi'\rangle$, odnosno odgovarajućom talasnom funkcijom $\psi'(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\psi'\rangle$. Uočimo da će talasna funkcija transformisanog sistema u tački $\mathbf{r}'$ imati istu vrednost kao talasna funkcija sistema pre transformacije u tački $\mathbf{r}$ (slika 9.1(a)), dakle

$$\psi'(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}). \tag{9.20}$$

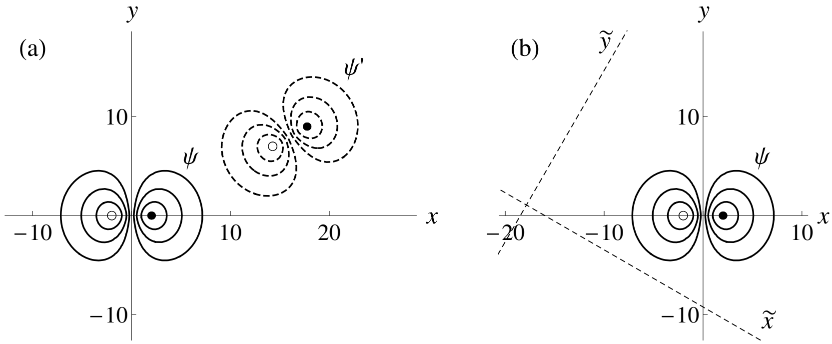
Koristeći relaciju (9.19), poslednja jednakost uzima oblik

$$\psi'(\mathsf{T}(\alpha)\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}). \tag{9.21}$$

Ova relacija važi za svaku tačku $\mathbf{r}$ referentnog sistema, pa i za tačku $\mathsf{T}^{-1}(\alpha)\mathbf{r}$, tj.

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathsf{T}^{-1}(\alpha)\mathbf{r}). \tag{9.22}$$

Dobijena formula određuje talasnu funkciju sistema nad kojim je izvršena prostorna transformacija koja je u konfiguracionom prostoru tog sistema definisana operatorom $\mathsf{T}(\alpha)$.




**Slika 9.1.** (a) Talasna funkcija $\psi(\mathbf{r}) = (32\pi)^{-1/2}e^{-r/2}x$ (tzv. $2p_x$ orbitala atoma vodonika) i njen lik $\psi'(\mathbf{r})$ dobijen pomoću relacije (9.22) pri (aktivnoj) prostornoj transformaciji $\mathsf{T}(\mathsf{R},\mathbf{a}) \in \mathrm{E}(3)$, koja se sastoji od rotacije R oko z-ose za ugao $\varphi = \pi/6$ i translacije za vektor $\mathbf{a} = 16\mathbf{e}_x + 8\mathbf{e}_y$. (Na slici su prikazani preseci funkcije sa ravni $z = 0$, pri čemu su položaji njenog minimuma i maksimuma označeni simbolima ∘, odnosno •). Svaka tačka $\mathbf{r}$ iz domena talasne funkcije $\psi$ ovom transformacijom preslikava se u odgovarajuću tačku $\mathbf{r}' = \mathsf{T}(\mathsf{R},\mathbf{a})\mathbf{r} \equiv \mathsf{R}\mathbf{r} + \mathbf{a}$, u kojoj transformisana funkcija $\psi'$ ima istu vrednost kao funkcija $\psi$ u tački $\mathbf{r}$. Pri računanju funkcije $\psi'$ argument funkcije $\psi$ na desnoj strani relacije (9.22) računa se kao $\mathsf{T}^{-1}(\mathsf{R},\mathbf{a})\mathbf{r} = \mathsf{R}^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{a})$. (b) Lokacija talasne funkcije $\psi$ u xy-ravni početnog koordinatnog sistema S i u $\tilde{x}\tilde{y}$-ravni koordinatnog sistema $\tilde{\mathrm{S}}$ dobijenog transformacijom $\mathsf{T}^{-1}(\mathsf{R},\mathbf{a})$ sistema S (pasivna transformacija). Može se uočiti da je lokacija talasne funkcije $\psi$ u sistemu $\tilde{\mathrm{S}}$ ekvivalentna lokaciji talasne funkcije $\psi'$ u sistemu S.

Posmatrajmo sada odgovarajuću pasivnu transformaciju, tj. prelazak u koordinatni sistem $\tilde{\mathrm{S}}$ dobijen transformacijom početnog koordinatnog sistema S (njegovog koordinatnog početka i osa) pomoću operatora $\mathsf{T}^{-1}(\alpha)$. Tada će tačka, koja je u sistemu S zadata vektorom položaja $\mathbf{r}$, u sistemu $\tilde{\mathrm{S}}$ biti određena vektorom $\tilde{\mathbf{r}} = \mathsf{T}(\alpha)\mathbf{r}$, dok će talasna funkcija $\psi(\mathbf{r})$ za posmatrača u sistemu $\tilde{\mathrm{S}}$ izgledati kao funkcija $\psi'$ ali sa argumentom $\tilde{\mathbf{r}}$ (uporediti funkciju $\psi$ na slici 9.1(b) sa funkcijom $\psi'$ na slici 9.1(a)). Prema tome, imamo $\psi(\mathbf{r}) = \psi'(\tilde{\mathbf{r}})$, što ponovo daje relaciju (9.22). Osvrćući se na diskusiju u poslednjem pasusu odeljka 9.1.1, relacija (9.22) može se interpretirati kao ekvivalencija između formi talasne funkcije nakon aktivne i nakon pasivne transformacije.

Neka je dalje $\hat{U}(\alpha)$ unitarni operator koji reprezentuje istu transformaciju u prostoru kvantnih stanja kao operator $\mathsf{T}(\alpha)$ u faznom (konfiguracionom) prostoru, dakle

$$|\psi'\rangle = \hat{U}(\alpha)|\psi\rangle. \tag{9.23}$$

Tada je $\psi'(\mathbf{r}) \equiv \langle\mathbf{r}\,|\,\psi'\rangle = \langle\mathbf{r}\,|\,\hat{U}(\alpha)|\psi\rangle$, što nam uz zapis $\psi(\mathsf{T}^{-1}(\alpha)\mathbf{r}) \equiv \langle\mathsf{T}^{-1}(\alpha)\mathbf{r}|\psi\rangle$ omogućava da relaciju (9.22) napišemo u obliku

$$\langle\mathbf{r}|\hat{U}(\alpha)|\psi\rangle = \langle\mathsf{T}^{-1}(\alpha)\mathbf{r}|\psi\rangle, \tag{9.24}$$

odakle, zbog proizvoljnosti vektora $|\psi\rangle$, sledi da je

$$\langle\mathbf{r}|\hat{U}(\alpha) = \langle\mathsf{T}^{-1}(\alpha)\mathbf{r}|. \tag{9.25}$$

Ermitskom konjugacijom poslednje relacije dobijamo $\hat{U}^{+}(\alpha)|\mathbf{r}\rangle = |\mathsf{T}^{-1}(\alpha)\mathbf{r}\rangle$, odnosno

$$\hat{U}^{-1}(\alpha)|\mathbf{r}\rangle = |\mathsf{T}^{-1}(\alpha)\mathbf{r}\rangle. \tag{9.26}$$

Pošto svaka transformacija kao element grupe simetrije ima odgovarajući inverzni element, koji je takođe element grupe, i pošto isto važi i za reprezentacije te grupe, zaključujemo da za svaku vrednost $\alpha$ iz domena parametara grupe postoji vrednost $\alpha'$ takva da je $\mathsf{T}^{-1}(\alpha) = \mathsf{T}(\alpha')$ i $\hat{U}^{-1}(\alpha) = \hat{U}(\alpha')$. Prema tome, iz jednakosti (9.26) sledi $\hat{U}(\alpha')|\mathbf{r}\rangle = |\mathsf{T}(\alpha')\mathbf{r}\rangle$, a pošto vrednosti $\alpha'$ pripadaju istom domenu kao i $\alpha$, konačno možemo pisati

$$\hat{U}(\alpha)|\mathbf{r}\rangle = |\mathsf{T}(\alpha)\mathbf{r}\rangle. \tag{9.27}$$

Relaciju (9.27) možemo interpretirati na sledeći način: Unitarni operator $\hat{U}(\alpha)$ prevodi svojstveni vektor $|\mathbf{r}\rangle$ opservable $\hat{\mathbf{r}}$, koji odgovara svojstvenoj vrednosti $\mathbf{r}$, u svojstveni vektor $|\mathbf{r}'\rangle$, koji odgovara svojstvenoj vrednosti $\mathbf{r}' = \mathsf{T}(\alpha)\mathbf{r}$. To znači da se preslikavanje (9.19), definisano u konfiguracionom prostoru operatorom $\mathsf{T}(\alpha)$, prenosi u istom obliku na skup svojstvenih vrednosti (spektar) opservable $\hat{\mathbf{r}}$. Ovo nije ništa drugo nego realizacija principa korespondencije između klasičnih i kvantnih vrednosti fizičke veličine (v. odeljak 1.2.4). Ako ovaj princip prihvatimo kao polaznu pretpostavku i primenimo na preslikavanje (9.19), definišući unitarni operator $\hat{U}(\alpha)$ preko delovanja na svojstvene vektore opservable $\hat{\mathbf{r}}$ kao $\hat{U}(\alpha)|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}'\rangle$, neposredno dolazimo do relacije (9.27) i nazad do relacija (9.24) i (9.22).

### 9.2.2 Inverzija prostora

Inverzija prostora definisana je preslikavanjem (9.2). Uvodeći operator transformacije $\mathsf{P}$, koji deluje u faznom prostoru, ovo preslikavanje možemo napisati u obliku

$$\mathsf{P}\mathbf{r} = -\mathbf{r}, \quad \mathsf{P}\mathbf{p} = -\mathbf{p}. \tag{9.28}$$

Uočimo da, ako se inverzija prostora izvrši dva puta uzastopno, imamo identično preslikavanje, tj. $\mathsf{P}^2 = \mathsf{I}$, odakle je $\mathsf{P}^{-1} = \mathsf{P}$, tj. ova transformacija sama je sebi inverzna. Odgovarajuća grupa simetrije, prema tome, ima dva elementa, $\mathsf{I}$ i $\mathsf{P}$.

Operator inverzije prostora $\hat{\Pi}$, koji deluje u prostoru stanja čestice $\mathcal{H}$, uvodimo uz pomoć relacije (9.27) koja, nakon smena $\mathsf{T} = \mathsf{P}$ i $\hat{U} = \hat{\Pi}$, uzima oblik

$$\hat{\Pi}|\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle. \tag{9.29}$$

Polazeći od ove relacije možemo dalje odrediti kako operator $\hat{\Pi}$ deluje na svojstvene vektore operatora impulsa $|\mathbf{p}\rangle$, ali i na proizvoljni vektor stanja $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. U prvom slučaju posmatrajmo delovanje obe strane ermitski konjugovane relacije (9.29) na vektor $|\mathbf{p}\rangle$ i iskoristimo izraz (8.75) za skalarni proizvod $\langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle$. Imamo

$$\langle\mathbf{r}|\hat{\Pi}|\mathbf{p}\rangle = \langle-\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \equiv \langle\mathbf{r}|-\mathbf{p}\rangle. \tag{9.30}$$

Pošto ova jednakost važi za sve svojstvene vektore operatora koordinate, a oni čine bazis po kome možemo razviti svaki vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, dalje važi $\langle\psi|\hat{\Pi}|\mathbf{p}\rangle = \langle\psi|-\mathbf{p}\rangle$, pa zbog proizvoljnosti vektora $|\psi\rangle$ imamo

$$\hat{\Pi}|\mathbf{p}\rangle = |-\mathbf{p}\rangle. \tag{9.31}$$

Konačno, delovanje operatora $\hat{\Pi}$ na proizvoljni vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ može se odrediti koristeći razvoj tog vektora u svojstvenom bazisu opservable $\hat{\mathbf{r}}$ ili opservable $\hat{\mathbf{p}}$ (izrazi (7.2.1) i (8.61)), npr.

$$\begin{aligned}\hat{\Pi}|\psi\rangle &= \hat{\Pi}\int\psi(\mathbf{r})|\mathbf{r}\rangle\,\mathrm{d}^3\mathbf{r} = \int\psi(\mathbf{r})\hat{\Pi}|\mathbf{r}\rangle\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}\\ &= \int\psi(\mathbf{r})|-\mathbf{r}\rangle\,\mathrm{d}^3\mathbf{r} = \int\psi(-\mathbf{r})|\mathbf{r}\rangle\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}.\end{aligned} \tag{9.32}$$

Lako se proverava da, ako operator $\hat{\Pi}$ primenimo dva puta uzastopno, početni vektor se neće promeniti. Dakle, kao i za operator $\mathsf{P}$, važi $\hat{\Pi}^2 = \hat{I}$ i $\hat{\Pi}^{-1} = \hat{\Pi}$. Uočimo da operator $\hat{\Pi}$, s obzirom na to da je unitaran i sam sebi inverzan, istovremeno je i ermitski.

Relacije (9.29) i (9.31) omogućavaju nam da odredimo kako se opservable $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$ transformišu pri inverziji prostora, tj. kakvog su oblika operatori $\hat{\Pi}\hat{\mathbf{r}}\hat{\Pi}^{-1}$ i $\hat{\Pi}\hat{\mathbf{p}}\hat{\Pi}^{-1}$. Njihovom primenom na odgovarajuće svojstvene vektore dobijamo

$$\hat{\Pi}\hat{\mathbf{r}}\hat{\Pi}^{-1}|\mathbf{r}\rangle = \hat{\Pi}\hat{\mathbf{r}}\hat{\Pi}|\mathbf{r}\rangle = \hat{\Pi}\hat{\mathbf{r}}|-\mathbf{r}\rangle = -\mathbf{r}\hat{\Pi}|-\mathbf{r}\rangle = -\mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle = -\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle, \tag{9.33}$$

$$\hat{\Pi}\hat{\mathbf{p}}\hat{\Pi}^{-1}|\mathbf{p}\rangle = \hat{\Pi}\hat{\mathbf{p}}\hat{\Pi}|\mathbf{p}\rangle = \hat{\Pi}\hat{\mathbf{p}}|-\mathbf{p}\rangle = -\mathbf{p}\hat{\Pi}|-\mathbf{p}\rangle = -\mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle = -\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle. \tag{9.34}$$

S obzirom na to da skupovi svih svojstvenih vektora operatora koordinate i operatora impulsa čine dva svojstvena bazisa po kojima možemo razviti proizvoljni vektor iz $\mathcal{H}$, uz istu argumentaciju kao za relaciju (9.31), zaključujemo da važi

$$\hat{\Pi}\hat{\mathbf{r}}\hat{\Pi}^{-1} = -\hat{\mathbf{r}}, \quad \hat{\Pi}\hat{\mathbf{p}}\hat{\Pi}^{-1} = -\hat{\mathbf{p}}. \tag{9.35}$$

Ispitajmo na kraju kako se transformiše talasna funkcija čestice $\psi(\mathbf{r})$ pri inverziji prostora. Transformisanu funkciju $\psi'(\mathbf{r})$ dobijamo koristeći formulu (9.22), u kojoj smo uzeli da je $\mathsf{T} = \mathsf{P}$. Pošto je $\mathsf{P}^{-1}\mathbf{r} = \mathsf{P}\mathbf{r} = -\mathbf{r}$, biće $\psi'(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r})$. Uvodeći operator inverzije prostora $\hat{P}$, koji, umesto na vektore stanja, deluje na talasne funkcije čestice (tj. u prostoru $\mathcal{L}^2$), transformacija funkcije $\psi(\mathbf{r})$ može se predstaviti relacijom[8]

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}). \tag{9.36}$$

Uočimo da, ako operator $\hat{P}$ primenimo dva puta uzastopno, početna talasna funkcija ostaće nepromenjena. Ovaj rezultat, napisan u obliku jednakosti $\hat{P}^2\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$, može se tumačiti kao svojstveni problem operatora $\hat{P}^2$, koji, na osnovu toga, ima samo jednu svojstvenu vrednost, $P^2 = 1$. Odavde zaključujemo da sam operator $\hat{P}$ ima

[8] Relacija (9.36) takođe se može dobiti ako skalarno pomnožimo krajnje levu i krajnje desnu stranu jednakosti (9.32) svojstvenim vektorom operatora koordinate. Zahvaljujući ortogonalnosti svojstvenih vektora, dobijamo jednakost $\langle\mathbf{r}|\hat{\Pi}|\psi\rangle = \psi(-\mathbf{r})$, pri čemu je $\langle\mathbf{r}|\hat{\Pi}|\psi\rangle = \langle\mathbf{r}|\psi'\rangle \equiv \psi'(\mathbf{r}) = \hat{P}\psi(\mathbf{r})$.

dve svojstvene vrednosti, $P = 1$ i $P = -1$. Odgovarajuće svojstvene funkcije su parne (engl. *even*) funkcije $\psi_e(\mathbf{r})$, za koje važi $\psi_e(-\mathbf{r}) = \psi_e(\mathbf{r})$, odnosno neparne (engl. *odd*) funkcije $\psi_o(\mathbf{r})$, za koje je $\psi_o(-\mathbf{r}) = -\psi_o(\mathbf{r})$. Iz tog razloga svojstvena vrednost operatora $\hat{P}$ naziva se *parnost*, a sam operator naziva se i operator parnosti[9].

Na osnovu delovanja (9.32) lako se pokazuje da operator $\hat{\Pi}$ ima iste svojstvene vrednosti $P = \pm 1$, pri čemu su odgovarajući svojstveni vektori $\int \psi_{e,o}(\mathbf{r})|\mathbf{r}\rangle\, d^3\mathbf{r}$. Prema tome, operatori $\hat{\Pi}$ i $\hat{P}$, iako reprezentuju istu transformaciju, formalno nisu isti pošto deluju u različitim prostorima ($\mathcal{H}$, odnosno $\mathcal{L}^2$). U stvari, oni predstavljaju različite reprezentacije iste transformacije. U odeljku 9.2.4 imaćemo sličnu situaciju sa operatorima $\hat{l}_z$ i $\hat{\ell}_z$, koji reprezentuju z-projekciju orbitnog momenta impulsa u navedenim prostorima.

Pomenimo da, ako hamiltonijan sistema komutira sa operatorom parnosti (ili, alternativno, $[\hat{H}, \hat{\Pi}] = 0$), ta dva operatora onda imaju zajedničke svojstvene funkcije (vektore), a parnost se održava ($P$ je „dobar kvantni broj"). Može se pokazati da to važi ukoliko je potencijal parna funkcija koordinata, kao u slučaju linearnog harmonijskog oscilatora, simetrične pravougaone potencijalne jame itd.

### 9.2.3 Prostorne translacije

Prostorna translacija za vektor $\mathbf{a}$ definisana je preslikavanjima (9.1) u kojima je $\mathsf{R} = \mathsf{I}$ i $\mathbf{v} = 0$, tj. preslikavanjima $\mathbf{r} \to \mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{a}$ i $\mathbf{p} \to \mathbf{p}' = \mathbf{p}$. Uvodeći operator transformacije $\mathsf{T}(\mathbf{a})$ koji deluje u faznom prostoru, ova preslikavanja možemo napisati u obliku

$$\mathsf{T}(\mathbf{a})\mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{a}, \quad \mathsf{T}(\mathbf{a})\mathbf{p} = \mathbf{p}. \tag{9.37}$$

Transformacija koja je inverzna prostornoj translaciji za vektor $\mathbf{a}$ je translacija za vektor $-\mathbf{a}$, dakle $\mathsf{T}^{-1}(\mathbf{a}) = \mathsf{T}(-\mathbf{a})$. Skup svih translacija čine Lijevu grupu $T_3$, kod koje je jedinični element nulta translacija $\mathsf{T}(\mathbf{0})$.

Unitarni operator $\hat{U}(\mathbf{a})$ koji reprezentuje prostornu translaciju za vektor $\mathbf{a}$ u prostoru stanja čestice $\mathcal{H}$ definisan je relacijom

$$\hat{U}(\mathbf{a})|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle, \tag{9.38}$$

koja se dobija iz opšte relacije (9.27) i preslikavanja vektora položaja (9.37). Ovaj operator već smo uveli i odredili u glavi 7 (poglavlje 7.1), prvo za česticu u jednoj dimenziji (izraz (7.2)), a zatim i u punom trodimenzionom prostoru (relacija (7.18)), gde ima oblik

$$\hat{U}(\mathbf{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}}. \tag{9.39}$$

Izraz (9.39) alternativno se može izvesti polazeći od izraza (9.12) za unitarni operator u eksponencijalnom obliku, koji u ovom slučaju glasi

$$\hat{U}(\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\Gamma}}}. \tag{9.40}$$

[9] Operator parnosti uveli smo još u petoj glavi prilikom razmatranja parnosti sfernih harmonika (odeljak 5.2.6), a parnost talasne funkcije ranije je razmatrana na primerima beskonačno duboke pravougaone potencijalne jame i linearnog harmonijskog oscilatora (odeljci 4.3.3 i 4.3.6).

Preostaje da se odredi generator $\hat{\mathbf{\Gamma}}$, koji je ovde vektorska opservabla. U tom cilju posmatraćemo infinitezimalnu translaciju $\mathbf{a} = \boldsymbol{\varepsilon} \to \mathbf{0}$ i iskoristićemo relaciju (9.24), koja u tom slučaju glasi

$$\langle \mathbf{r}|\hat{U}(\boldsymbol{\varepsilon})|\psi\rangle = \langle \mathbf{r} - \boldsymbol{\varepsilon}|\psi\rangle \equiv \psi(\mathbf{r} - \boldsymbol{\varepsilon}). \tag{9.41}$$

Izraz (9.40) za operator $\hat{U}(\mathbf{a})$ u slučaju $\mathbf{a} = \boldsymbol{\varepsilon} \to \mathbf{0}$ svodi se na

$$\hat{U}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \hat{I} - i\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{\Gamma}}, \tag{9.42}$$

a, umesto talasne funkcije $\psi(\mathbf{r} - \boldsymbol{\varepsilon})$, možemo uzeti njen razvoj u red oko tačke $\mathbf{r}$ do linearnog člana, tj.

$$\psi(\mathbf{r} - \boldsymbol{\varepsilon}) = \psi(\mathbf{r}) - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \equiv \psi(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \nabla \psi. \tag{9.43}$$

Zamenjujući poslednja dva izraza u jednakost (9.41), dobija se

$$\langle \mathbf{r}|(\hat{I} - i\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{\Gamma}})|\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \nabla \psi. \tag{9.44}$$

Pošto se izraz na levoj strani može napisati u obliku $\psi(\mathbf{r}) - i\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{\Gamma}}|\psi\rangle$, izjednačavanjem linearnih članova po $\boldsymbol{\varepsilon}$ sa obe strane jednakosti, dobijamo

$$\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{\Gamma}}|\psi\rangle = -i\nabla \psi. \tag{9.45}$$

Izraz na desnoj strani poslednje jednakosti, ako se pomnoži sa $\hbar$, predstavlja delovanje operatora impulsa na stanje $|\psi\rangle$ u koordinatnoj reprezentaciji (relacija (8.48)), dakle $-i\hbar\nabla\psi = \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle$. Prema tome, jednakost (9.45) može se napisati u obliku $\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{\Gamma}}|\psi\rangle = \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle/\hbar$, odakle sledi da je

$$\hat{\mathbf{\Gamma}} = \hat{\mathbf{p}}/\hbar. \tag{9.46}$$

Zamenjujući dobijeni izraz za generator u opšti izraz (9.40), dobijamo rezultat (9.39).

Razmotrimo sada delovanje operatora $\hat{U}(\mathbf{a})$ na svojstvene vektore opservable $\hat{\mathbf{p}}$. U tom cilju ćemo posmatrati delovanje obe strane ermitski konjugovane relacije (9.38) na te vektore i iskoristiti izraz (8.75) za skalarni proizvod $\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle$, dakle

$$\langle \mathbf{r}|\hat{U}(\mathbf{a})|\mathbf{p}\rangle = \langle \mathbf{r} - \mathbf{a}|\mathbf{p}\rangle \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{a})} \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}}\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle. \tag{9.47}$$

Pošto skup svih svojstvenih vektora operatora koordinate predstavlja svojstveni bazis po kojem možemo razviti proizvoljni vektor iz $\mathcal{H}$, uz istu argumentaciju kao za relaciju (9.31), zaključujemo da važi

$$\hat{U}(\mathbf{a})|\mathbf{p}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}}|\mathbf{p}\rangle. \tag{9.48}$$

Delovanje operatora $\hat{U}(\mathbf{a})$ na proizvoljni vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ može se odrediti koristeći npr. razvoj tog vektora u svojstvenom bazisu opservable $\hat{\mathbf{r}}$ (izraz (7.21)). Tada je

$$\begin{aligned} \hat{U}(\mathbf{a})|\psi\rangle &= \hat{U}(\mathbf{a}) \int \psi(\mathbf{r})|\mathbf{r}\rangle \,\mathrm{d}^3\mathbf{r} = \int \psi(\mathbf{r})\hat{U}(\mathbf{a})|\mathbf{r}\rangle \,\mathrm{d}^3\mathbf{r} \\ &= \int \psi(\mathbf{r})|\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle \,\mathrm{d}^3\mathbf{r} = \int \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a})|\mathbf{r}\rangle \,\mathrm{d}^3\mathbf{r}. \end{aligned} \tag{9.49}$$

Ako krajnje strane ove jednakosti skalarno pomnožimo svojstvenim vektorom operatora koordinate, tj. ako pređemo na koordinatnu reprezentaciju, koristeći ortogonalnost tih vektora, dobijamo jednakost $\langle\mathbf{r}\,|\hat{U}(\mathbf{a})|\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}-\mathbf{a})$. Pošto je $\langle\mathbf{r}\,|\hat{U}(\mathbf{a})|\psi\rangle = \langle\mathbf{r}\,|\psi'\rangle \equiv \psi'(\mathbf{r})$, talasna funkcija čestice nad kojom je izvršena translacija za vektor $\mathbf{a}$ glasi

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}-\mathbf{a}). \tag{9.50}$$

Uočimo da ovaj razultat takođe sledi iz relacije (9.22) ako izaberemo da je $\mathsf{T} = \mathsf{T}(\mathbf{a})$.

Ispitajmo još kako se opservable $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$ transformišu pri prostornim translacijama, tj. kakvog su oblika operatori $\hat{U}(\mathbf{a})\hat{\mathbf{r}}\hat{U}^{-1}(\mathbf{a})$ i $\hat{U}(\mathbf{a})\hat{\mathbf{p}}\hat{U}^{-1}(\mathbf{a})$. U tom cilju posmatrajmo delovanje ovih izraza na svojstvene vektore operatora koordinate i impulsa. Uočavajući da je $\hat{U}^{-1}(\mathbf{a}) = \hat{U}(-\mathbf{a})$ i koristeći relacije (9.38) i (9.48), imamo

$$\begin{aligned}\hat{U}(\mathbf{a})\hat{\mathbf{r}}\hat{U}^{-1}(\mathbf{a})|\mathbf{r}\rangle &= \hat{U}(\mathbf{a})\hat{\mathbf{r}}\hat{U}(-\mathbf{a})|\mathbf{r}\rangle = \hat{U}(\mathbf{a})\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}-\mathbf{a}\rangle \\ &= (\mathbf{r}-\mathbf{a})\hat{U}(\mathbf{a})|\mathbf{r}-\mathbf{a}\rangle = (\mathbf{r}-\mathbf{a})|\mathbf{r}\rangle = (\hat{\mathbf{r}}-\mathbf{a})|\mathbf{r}\rangle,\end{aligned} \tag{9.51}$$

i

$$\begin{aligned}\hat{U}(\mathbf{a})\hat{\mathbf{p}}\hat{U}^{-1}(\mathbf{a})|\mathbf{p}\rangle &= \hat{U}(\mathbf{a})\hat{\mathbf{p}}\hat{U}(-\mathbf{a})|\mathbf{p}\rangle = \hat{U}(\mathbf{a})\hat{\mathbf{p}}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\mathbf{p}}\hat{U}(\mathbf{a})\mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\mathbf{p}}\mathbf{p}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle = \hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle.\end{aligned} \tag{9.52}$$

Odavde, koristeći iste argumente kao za relacije (9.35), zaključujemo da važi

$$\hat{U}(\mathbf{a})\hat{\mathbf{r}}\hat{U}^{-1}(\mathbf{a}) = \hat{\mathbf{r}}-\mathbf{a}, \quad \hat{U}(\mathbf{a})\hat{\mathbf{p}}\hat{U}^{-1}(\mathbf{a}) = \hat{\mathbf{p}}. \tag{9.53}$$

Jedna od najvažnijih primena prostornih translacija je u fizici čvrstog stanja. Zbog periodičnosti kristalne rešetke, hamiltonijan koji opisuje dinamiku elektrona u (idealnom) kristalu, a time i njegove svojstvene funkcije, invarijantni su pod translacijama čiji pomeraj je celobrojni umnožak perioda rešetke u sva tri prostorna pravca[10].

### 9.2.4 Rotacije

Neka je $\mathsf{R}(\varphi,\mathbf{e})$ matrica rotacije u konfiguracionom prostoru čestice za ugao $\varphi$ oko pravca zadatog ortom $\mathbf{e}$. Koristićemo, takođe, oznaku $\mathsf{R}(\boldsymbol{\varphi})$, gde komponente vektora $\boldsymbol{\varphi} = \varphi\mathbf{e}$ igraju ulogu Lijevih parametara transformacije. Ako su $\mathbf{r}$ i $\mathbf{p}$ vektori položaja i impulsa čestice pre rotacije, njen položaj i impuls nakon rotacije biće određeni vektorima $\mathbf{r}' = \mathsf{R}(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{r}$ i $\mathbf{p}' = \mathsf{R}(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{p}$. Transformacija koja je inverzna rotaciji zadatoj vektorom $\boldsymbol{\varphi}$ je rotacija zadata vektorom $-\boldsymbol{\varphi}$, dakle $\mathsf{R}^{-1}(\boldsymbol{\varphi}) = \mathsf{R}(-\boldsymbol{\varphi})$. Skup svih rotacija čine rotacionu grupu R(3), čiji jedinični element je rotacija za nulti ugao[11].

Na osnovu relacije (9.27), unitarni operator $\hat{U}(\boldsymbol{\varphi})$ koji reprezentuje rotaciju $\mathsf{R}(\boldsymbol{\varphi})$ u prostoru stanja čestice $\mathcal{H}$ definisan je relacijom

$$\hat{U}(\boldsymbol{\varphi})|\mathbf{r}\rangle = |\mathsf{R}(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{r}\rangle. \tag{9.54}$$

[10]Ovo je obrađeno u svim udžbenicima iz fizike čvrstog stanja. Preporučujemo „Uvod u fiziku čvrstog stanja" Čarlsa Kitela (Charles Kittel) u izdanju Savremene administracije iz 1970.

[11]Rotaciona grupa je izomorfna tzv. specijalnoj ortogonalnoj grupi SO(3), čiji su elementi $3\times 3$ realne ortogonalne matrice jedinične determinante (bibl. ref. II.B.1 i II.B.2).

Delovanje operatora $\hat{U}(\boldsymbol{\varphi})$ na proizvoljni vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ dobija se koristeći razvoj tog vektora u svojstvenom bazisu opservable $\hat{\mathbf{r}}$ (izraz (7.21)). Imamo

$$\begin{aligned}\hat{U}(\boldsymbol{\varphi})|\psi\rangle &= \hat{U}(\boldsymbol{\varphi})\int \psi(\mathbf{r})|\mathbf{r}\rangle\, \mathrm{d}^3\mathbf{r} = \int \psi(\mathbf{r})\hat{U}(\boldsymbol{\varphi})|\mathbf{r}\rangle\, \mathrm{d}^3\mathbf{r} \\ &= \int \psi(\mathbf{r})|\mathsf{R}(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{r}\rangle\, \mathrm{d}^3\mathbf{r} = \int \psi(\mathsf{R}^{-1}(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{r})|\mathbf{r}\rangle\, \mathrm{d}^3\mathbf{r}.\end{aligned} \tag{9.55}$$

Ako krajnje levu i krajnje desnu stranu ove jednakosti pomnožimo skalarno svojstvenim vektorom operatora koordinate, analognim postupkom kao u slučaju translacije dobijamo

$$\langle \mathbf{r}\,|\hat{U}(\boldsymbol{\varphi})|\psi\rangle = \psi(\mathsf{R}^{-1}(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{r}). \tag{9.56}$$

Pošto je $\langle \mathbf{r}\,|\hat{U}(\mathbf{a})|\psi\rangle = \langle \mathbf{r}\,|\psi'\rangle \equiv \psi'(\mathbf{r})$, sledi da desna strana jednakosti (9.56) predstavlja izraz za talasnu funkciju čestice nakon rotacije zadate vektorom $\boldsymbol{\varphi}$, tj.

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathsf{R}^{-1}(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{r}). \tag{9.57}$$

Isti izraz dobija se iz formule (9.22) ako izaberemo da je $\mathsf{T} = \mathsf{R}(\boldsymbol{\varphi})$.

U nastavku ćemo odrediti eksplicitan izraz za operator rotacije $\hat{U}(\boldsymbol{\varphi})$. Pokazaćemo prvo kako se izraz za taj operator dobija u specijalnom slučaju rotacije oko z-ose. Matrica rotacije u tom slučaju ima oblik

$$\mathsf{R}(\varphi, \mathbf{e}_z) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{9.58}$$

Polazeći od opšteg izraza (9.12), odgovarajući operator rotacije u prostoru stanja $\mathcal{H}$ može se predstaviti u eksponencijalnom obliku

$$\hat{U}(\varphi, \mathbf{e}_z) = e^{-i\varphi\hat{\Gamma}}. \tag{9.59}$$

Da bismo odredili generator $\hat{\Gamma}$ ove transformacije, ovde ćemo posmatrati rotaciju za infinitezimalni ugao $\varphi = \varepsilon \to 0$ i iskoristiti relaciju (9.56) koja u tom slučaju glasi

$$\langle \mathbf{r}|\hat{U}(\varepsilon, \mathbf{e}_z)|\psi\rangle = \psi(\mathsf{R}^{-1}(\varepsilon, \mathbf{e}_z)\mathbf{r}). \tag{9.60}$$

Izraz (9.59) tada se svodi na

$$\hat{U}(\varepsilon, \mathbf{e}_z) = \hat{I} - i\varepsilon\hat{\Gamma}, \tag{9.61}$$

a matrica rotacije (9.58) i odgovarajuća inverzna matrica glase

$$\mathsf{R}(\varepsilon, \mathbf{e}_z) = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathsf{R}^{-1}(\varepsilon, \mathbf{e}_z) = \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon & 0 \\ -\varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{9.62}$$

Tada je

$$\mathsf{R}^{-1}(\varepsilon,\mathbf{e}_z)\mathbf{r} = \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon & 0 \\ -\varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x+\varepsilon y \\ y-\varepsilon x \\ z \end{pmatrix} = \mathbf{r} + \varepsilon(y\mathbf{e}_x - x\mathbf{e}_y), \tag{9.63}$$

pa se funkcija na desnoj strani jednakosti (9.60) može zameniti svojim razvojem oko tačke $\mathbf{r}$ do linearnog člana po $\varepsilon$

$$\begin{aligned}\psi(\mathsf{R}^{-1}\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r}+\varepsilon(y\mathbf{e}_x - x\mathbf{e}_y)) = \psi(\mathbf{r}) + \varepsilon\nabla\psi\cdot(y\mathbf{e}_x - x\mathbf{e}_y) \\ &= \psi(\mathbf{r}) + \varepsilon\left(y\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) = \psi(\mathbf{r}) - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{\ell}_z\psi(\mathbf{r}).\end{aligned} \tag{9.64}$$

Na kraju je iskorišten izraz (3.107) za operator z-projekcije orbitnog ugaonog momenta $\hat{\ell}_z$ koji deluje na talasne funkcije. Ako je $\hat{l}_z$ odgovarajući operator koji deluje na vektore stanja, $\hat{\ell}_z$ je njegova koordinatna reprezentacija, pa imamo $\hat{\ell}_z\psi(\mathbf{r}) \equiv \langle\mathbf{r}|\hat{l}_z|\psi\rangle$. Zamenjujući desnu stranu jednakosti (9.60) razvojem (9.64) sa poslednjom smenom, a operator $\hat{U}(\varepsilon,\mathbf{e}_z)$ na levoj strani jednakosti (9.60) razvojem (9.61), dobijamo

$$\langle\mathbf{r}|(1-i\varepsilon\hat{\Gamma})|\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}) - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\langle\mathbf{r}|\hat{l}_z|\psi\rangle. \tag{9.65}$$

Izjednačavanjem linearnih članova po $\varepsilon$ sa obe strane jednakosti sledi $\hat{\Gamma} = \hat{l}_z/\hbar$, što zamenom u izraz (9.59) daje

$$\hat{U}(\varphi,\mathbf{e}_z) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\hat{l}_z}. \tag{9.66}$$

Pošto za z-osu možemo uzeti proizvoljni pravac u prostoru zadat ortom $\mathbf{e}$, imaćemo $\varphi\hat{l}_z = \varphi\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{l}} = \boldsymbol{\varphi}\cdot\hat{\mathbf{l}}$, gde je $\hat{\mathbf{l}}$ operator orbitnog ugaonog momenta, pa se izraz (9.66) direktno uopštava na oblik

$$\hat{U}(\boldsymbol{\varphi}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\varphi}\cdot\hat{\mathbf{l}}}, \tag{9.67}$$

koji predstavlja operator rotacije u prostoru $\mathcal{H}$ za ugao $\varphi$ oko proizvoljnog pravca $\mathbf{e}$.

Ako vektor $\boldsymbol{\varphi}$ i vektorski operator $\hat{\mathbf{l}}$ razložimo na komponente u nekom naknadno izabranom pravougaonom koordinatnom sistemu (gde je u opštem slučaju $\mathbf{e} \neq \mathbf{e}_z$), operator rotacije se može napisati u obliku

$$\hat{U}(\boldsymbol{\varphi}) = e^{-\frac{i}{\hbar}(\varphi_x\hat{l}_x + \varphi_y\hat{l}_y + \varphi_z\hat{l}_z)}, \tag{9.68}$$

gde su $\varphi_x$, $\varphi_y$, $\varphi_z$ komponente vektora $\boldsymbol{\varphi}$ (Lijevi parametri), a $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$ odgovarajuće komponente operatora $\hat{\mathbf{l}}$ (generatori $\times\,\hbar$). Napomenimo, međutim, da zbog nekomutiranja tih komponenata (relacije (5.17)) imamo $\hat{U}(\boldsymbol{\varphi}) \neq e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi_x\hat{l}_x}e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi_y\hat{l}_y}e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi_z\hat{l}_z}$ [12].

Navedimo na kraju da se komutacione relacije (5.17) mogu izvesti analizirajući uzastopno delovanje operatora infinitezimalnih rotacija oko osa koordinatnog sistema na svojstvene vektore operatora koordinate[13]. Prema tome, grupa rotacija R(3) definiše algebru ugaonog momenta kao odgovarajuću Lijevu algebru.

[12] Proizvoljna rotacija alternativno se može izraziti preko Ojlerovih (Leonhard Euler) uglova $\alpha$, $\beta$, $\gamma$. Pokazuje se da se operator rotacije tada može predstaviti u obliku $\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma) = e^{-i\alpha\hat{l}_z/\hbar}e^{-i\beta\hat{l}_y/\hbar}e^{-i\gamma\hat{l}_z/\hbar}$.

[13] Videti npr. izvođenje u knjizi „Gradivni blokovi kvantne mehanike, teorija i primene" Šijana (T. Xiang, bibl. ref. 2.A.7), str. 159.

## 9.3 Unitarne transformacije koje se odnose na vremensku evoluciju

### 9.3.1 Evolucioni operator i zakon kretanja u integralnom obliku

Vremenska evolucija kvantnog sistema, kako je navedeno u VII postulatu (odeljak 6.3.7), određena je Šredingerovom jednačinom (jednačina (6.75)). Ako je poznato stanje sistema u početnom trenutku $t_0$, ova jednačina određuje njegovo stanje u proizvoljnom trenutku $t$. Pošto se radi o diferencijalnoj jednačini, kažemo da Šredingerova jednačina predstavlja zakon kretanja u diferencijalnom obliku.

S obzirom na to da je Šredingerova jednačina linearna, vektor $|\psi(t)\rangle$, koji opisuje stanje kvantnog sistema u proizvoljnom trenutku $t$, može se predstaviti kao rezultat delovanja izvesnog linearnog operatora $\hat{U}(t, t_0)$ na vektor $|\psi_0(t)\rangle$ koji opisuje stanje sistema u početnom trenutku $t_0$, dakle

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \tag{9.69}$$

pri čemu je

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}. \tag{9.70}$$

Operator $\hat{U}(t, t_0)$ naziva se *evolucioni operator*, a jednačina (9.69) *zakon kretanja u integralnom obliku*.

Da bi bio zadovoljen uslov održanja norme vektora stanja, evolucioni operator mora biti *unitaran*. Naime, ako ovaj uslov napišemo u obliku $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle$, primenom jednačine (9.69) i odgovarajuće ermitski konjugovane jednačine $\langle\psi(t)| = \langle\psi(t_0)|\hat{U}^+(t, t_0)$ dobijamo

$$\langle\psi(t_0)|\hat{U}^+(t, t_0)\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle, \tag{9.71}$$

odakle proizilazi uslov unitarnosti

$$\hat{U}^+(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \hat{I}. \tag{9.72}$$

Jednačina za evolucioni operator dobija se neposredno iz Šredingerove jednačine (6.75). Zamenjujući vektor $|\psi(t)\rangle$ na obema stranama jednačine izrazom (9.69), sledi

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \tag{9.73}$$

a, zbog proizvoljnosti vektora $|\psi(t_0)\rangle$, možemo pisati

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0) \tag{9.74}$$

uz uslov (9.70). Ako ovu jednačinu formalno integralimo, dobijamo alternativnu jednačinu u integralnom obliku

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(t')\hat{U}(t', t_0)\,\mathrm{d}t'. \tag{9.75}$$

U svetlu opšte diskusije o prostorno-vremenskim transformacijama (poglavlje 9.1) jednačina (9.69) predstavlja reprezentaciju vremenske translacije $t_0 \to t$ u prostoru stanja kvantnog sistema, pri čemu je, kao što je očekivano, operator transformacije $\hat{U}(t, t_0)$ unitaran. U ovom slučaju reč je o spontanoj aktivnoj vremenskoj translaciji za $b = t - t_0$.

### 9.3.2 Evolucioni operator i zakon kretanja konzervativnog sistema

Rešavanje operatorske jednačine (9.74) nije trivijalan zadatak zbog nekomutativnosti množenja operatora. Međutim, za konzervativne sisteme, kod kojih hamiltonijan ne zavisi od vremena, dobija se jednostavno formalno rešenje

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}. \tag{9.76}$$

Treba, međutim, imati na umu da je korektna interpretacija operatorske funkcije jedino njen razvoj u stepeni red (v. odeljak 7.1.1, fusnota 2), koji je u ovom slučaju oblika

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \hat{H}^k (t - t_0)^k. \tag{9.77}$$

Zamenjujući ovaj izraz u jednačinu (9.74), lako se proverava da on jeste njeno rešenje.

Koristeći izraz (9.76), zakon kretanja u integralnom obliku za konzervativni sistem glasi

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|\psi(t_0)\rangle. \tag{9.78}$$

Da bismo na desnoj strani jednačine odredili delovanje evolucionog operatora na vektor $|\psi(t_0)\rangle$, ovaj vektor ćemo razviti po svojstvenim vektorima $|n\rangle$ hamiltonijana $\hat{H}$, tj. napisati u obliku $|\psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$, i ponovo iskoristiti razvoj (9.77). Radi jednostavnosti posmatraćemo nedegenerisani slučaj (pri čemu je $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$) i uzećemo da je $t_0 = 0$. Sledi

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\sum_n c_n|n\rangle = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^k \sum_n c_n|n\rangle \\
&= \sum_n c_n \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^k |n\rangle = \sum_n c_n \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)^k |n\rangle \\
&= \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle,
\end{aligned} \tag{9.79}$$

što je u skladu sa opštim rešenjem Šredingerove jednačine (6.78).

### 9.3.3 Zakon kretanja u integralnom obliku za kvantni sistem u mešanom stanju

U odeljku 6.4.7 videli smo da je vremenska zavisnost operatora gustine koji opisuje mešano stanje kvantnog sistema određena Fon Nojmanovom jednačinom (6.110). Međutim, kao i u slučaju čistog stanja, promena mešanog stanja sa vremenom se alternativno može izraziti preko evolucionog operatora. Predstavljajući operator gustine $\hat{\rho}$ u obliku razlaganja (6.89), a vremensku zavisnost ket i bra vektora koji figurišu u tom razlaganju preko evolucionog operatora $\hat{U}(t, t_0)$ (relacija (9.69)), dakle

$$|\psi_k(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi_k(t_0)\rangle, \tag{9.80}$$

$$\langle\psi_k(t)| = \langle\psi_k(t_0)|\hat{U}(t, t_0)^+, \tag{9.81}$$

sledi

$$\begin{aligned}\hat{\rho}(t) &= \sum_k w_k|\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)| = \sum_k w_k\hat{U}(t, t_0)|\psi_k(t_0)\rangle\langle\psi_k(t_0)|\hat{U}^+(t, t_0)\\ &= \hat{U}(t, t_0)\left(\sum_k w_k|\psi_k(t_0)\rangle\langle\psi_k(t_0)|\right)\hat{U}^+(t, t_0),\end{aligned} \tag{9.82}$$

odnosno

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}^+(t, t_0), \tag{9.83}$$

gde je $\hat{\rho}(t_0)$ operator gustine u početnom trenutku $t_0$.

### 9.3.4 Zakon kretanja za srednju vrednost opservable. Šredingerova i Hajzenbergova slika

Zakon kretanja za srednju (očekivanu) vrednost opservable $\hat{A}$ (uopštenje Erenfestovih jednačina, v. odeljak 4.2.3, jednačina (4.45)) glasi

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle. \tag{9.84}$$

Ako se osvrnemo na izvođenje (4.44) ove jednačine, koje se zasniva na računanju izvoda izraza za srednju vrednost $\langle\hat{A}\rangle \equiv \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ posmatranog kao proizvod tri faktora koji zavise od vremena, vidimo da se član $\langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle/i\hbar$ na njenoj desnoj strani pojavljuje kao posledica zavisnosti stanja kvantnog sistema od vremena i važenja Šredingerove jednačine. Pri tome, član $\langle\partial\hat{A}/\partial t\rangle$ različit je od nule samo ukoliko operator $\hat{A}$ ekplicitno zavisi od vremena (npr. zbog delovanja neke promenljive spoljašnje sile na sistem). Formulacija kvantne mehanike u kojoj je evolucija kvantnog sistema opisana promenom njegovog stanja u toku vremena, koja je određena Šredingerovom jednačinom (VII postulat) ili evolucionim operatorom (jednačina (9.69)), naziva se *Šredingerova slika*.

Evoluciju kvantnog sistema, međutim, moguće je opisati i na drugačiji način. Pritom mora biti ispunjen uslov da vremenska zavisnost svih merljivih veličina, kao što su verovatnoće, te svojstvene i srednje vrednosti opservabli, bude ista kao u Šredingerovoj slici. Ako je ovaj uslov ispunjen, ponašanje vektora stanja, odnosno talasnih funkcija, i opservabli može po tom pitanju da bude drugačije od onog u Šredingerovoj slici. Formulacija kvantne mehanike u kojoj su opservable nosioci evolucije sistema, a vektor stanja se ne menja sa vremenom, naziva se *Hajzenbergova slika*.

Da bismo vektore stanja i opservable predstavljene u Šredingerovoj i u Hajzenbergovoj slici razlikovali, u nastavku ćemo uz njihove oznake u indeksu pisati slovo „S", odnosno „H". Recimo, Šredingerovu jednačinu (6.75) dalje ćemo pisati

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle = \hat{H}_{\mathrm{S}}(t)|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle, \tag{9.85}$$

a zakon kretanja u integralnom obliku (9.69) kao

$$|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi_{\mathrm{S}}(t_0)\rangle. \tag{9.86}$$

Evolucija kvantnog sistema u Hajzenbergovoj slici određena je jednačinama čijim se rešavanjem dobija opis kako se opservable menjaju u toku vremena. Ove jednačine mogu se izvesti na više načina. Jedan od njih je iz zakona kretanja za srednju vrednost opservable, koji mora biti isti u obe slike. U Hajzenbergovoj slici ukupna promena srednje vrednosti $\langle\hat{A}\rangle$ sa vremenom potiče isključivo od promene opservable $\hat{A}_{\mathrm{H}}(t)$. Prema tome, važi $\mathrm{d}\langle\hat{A}_{\mathrm{H}}\rangle/\mathrm{d}t = \langle\mathrm{d}\hat{A}_{\mathrm{H}}/\mathrm{d}t\rangle$, na osnovu čega se zakon kretanja za srednju vrednost opservable $\hat{A}_{\mathrm{H}}$ može napisati u obliku

$$\left\langle\frac{\mathrm{d}\hat{A}_{\mathrm{H}}}{\mathrm{d}t} - \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_{\mathrm{H}}(t),\hat{H}_{\mathrm{H}}(t)] - \frac{\partial\hat{A}_{\mathrm{H}}}{\partial t}\right\rangle = 0. \tag{9.87}$$

Pošto ova jednačina važi za svaki vektor $|\psi_{\mathrm{H}}\rangle$, sledi da važi operatorska jednačina

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}_{\mathrm{H}}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_{\mathrm{H}}(t),\hat{H}_{\mathrm{H}}(t)] + \frac{\partial\hat{A}_{\mathrm{H}}}{\partial t}, \tag{9.88}$$

koja opisuje ukupnu vremensku promenu opservable $\hat{A}_{\mathrm{H}}(t)$ u Hajzenbergovoj slici i naziva se *Hajzenbergova jednačina kretanja* za tu opservablu.

### 9.3.5 Prelazak iz Šredingerove slike u Hajzenbergovu sliku

Polazeći od zakona kretanja u integralnom obliku (jednačina (9.86)), promena vektora stanja kvantnog sistema u Šredingerovoj slici $|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle$ u toku vremena može se posmatrati kao spontana aktivna vremenska translacija vektora tog stanja u početnom trenutku $t_0$, opisana evolucionim operatorom $\hat{U}(t,t_0)$ posmatranog sistema. Odatle proizilazi da se ta promena može poništiti inverznom transformacijom, tj. delovanjem operatora $\hat{U}^{-1}(t,t_0)$ na vektor $|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle$, i na taj način dobiti odgovarajući vektor stanja u Hajzenbergovoj slici. Dakle

$$|\psi_{\mathrm{H}}\rangle = \hat{U}^{-1}(t,t_0)|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle = \hat{U}^{-1}(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)|\psi_{\mathrm{S}}(t_0)\rangle = |\psi_{\mathrm{S}}(t_0)\rangle. \tag{9.89}$$

Prema tome, vektor stanja u Hajzenbergovoj slici jednak je odgovarajućem vektoru u Šredingerovoj slici u proizvoljno izabranom početnom trenutku $t_0$.

Koristeći isti operator $\hat{U}^{-1}(t,t_0)$ i relaciju (9.11), opservabla $\hat{A}_\mathrm{H}(t)$ u Hajzenbergovoj slici dobija se iz odgovarajuće opservable $\hat{A}_\mathrm{S}(t)$ u Šredingerovoj slici transformacijom

$$\hat{A}_\mathrm{H}(t) = \hat{U}^{-1}(t,t_0)\hat{A}_\mathrm{S}(t)\hat{U}(t,t_0), \tag{9.90}$$

pri čemu je $\hat{A}_\mathrm{H}(t_0) = \hat{A}_\mathrm{S}(t_0)$. Zahvaljujući unitarnosti transformacije, sve opservabilne veličine i izrazi koji se koriste za njihovo računanje, kao i komutacione relacije među opservablama[14], invarijantne su pri prelasku iz jedne slike u drugu (v. odeljak 9.1.5).

Prelazak iz Šredingerove slike u Hajzenbergovu sliku može se tretirati kao transformacija iz jedne reprezentacije u drugu, pri čemu je $\hat{U}^{-1}(t,t_0)$ unitarni operator transformacije koja je u ovom slučaju pasivna.

Hajzenbergove jednačine takođe se mogu izvesti iz relacije (9.90). Ako obe strane ove jednakosti diferenciramo po vremenu i iskoristimo izraz $\mathrm{d}\hat{U}/\mathrm{d}t = \hat{H}_\mathrm{S}\hat{U}/i\hbar$, koji direktno sledi iz jednačine (9.74), i izraz $\mathrm{d}\hat{U}^{-1}/\mathrm{d}t = -\hat{U}^{-1}\hat{H}_\mathrm{S}/i\hbar$, koji se dobija ermitskom konjugacijom prethodnog uz smenu $\hat{U}^{+} = \hat{U}^{-1}$, ne navodeći vremensku zavisnost operatora radi kraćeg zapisa, imamo

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\hat{A}_\mathrm{H}}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}\hat{U}^{-1}}{\mathrm{d}t}\hat{A}_\mathrm{S}\hat{U} + \hat{U}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{A}_\mathrm{S}}{\mathrm{d}t}\hat{U} - \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^{-1}\hat{A}_\mathrm{S}\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\\ &= -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^{-1}\hat{H}_\mathrm{S}\hat{A}_\mathrm{S}\hat{U} + \hat{U}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{A}_\mathrm{S}}{\mathrm{d}t}\hat{U} + \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^{-1}\hat{A}_\mathrm{S}\hat{H}_\mathrm{S}\hat{U}\\ &= -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^{-1}\hat{H}_\mathrm{S}\hat{U}\hat{U}^{-1}\hat{A}_\mathrm{S}\hat{U} + \hat{U}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{A}_\mathrm{S}}{\mathrm{d}t}\hat{U} + \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^{-1}\hat{A}_\mathrm{S}\hat{U}\hat{U}^{-1}\hat{H}_\mathrm{S}\hat{U}\\ &= -\frac{1}{i\hbar}\hat{H}_\mathrm{H}\hat{A}_\mathrm{H} + \hat{U}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{A}_\mathrm{S}}{\mathrm{d}t}\hat{U} + \frac{1}{i\hbar}\hat{A}_\mathrm{H}\hat{H}_\mathrm{H} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_\mathrm{H},\hat{H}_\mathrm{H}] + \frac{\partial\hat{A}_\mathrm{H}}{\partial t}.\end{aligned} \tag{9.91}$$

Dakle, ponovo dobijamo jednačinu (9.88), pri čemu poslednji član u krajnjem izrazu ima značenje $\partial\hat{A}_\mathrm{H}/\partial t = \hat{U}^{-1}(\mathrm{d}\hat{A}_\mathrm{S}/\mathrm{d}t)\hat{U}$.

Ukoliko veličina $A$ ne zavisi eksplicitno od vremena, tada ni opservabla $\hat{A}_S$ ne zavisi od vremena i Hajzenbergova jednačina se redukuje na oblik $\mathrm{d}\hat{A}_\mathrm{H}/\mathrm{d}t = [\hat{A}_\mathrm{H},\hat{H}_\mathrm{H}]/i\hbar$. Ako, uz to, $\hat{A}_\mathrm{S}$ komutira sa $\hat{H}_\mathrm{S}$, što znači da i $\hat{A}_\mathrm{H}$ komutira sa $\hat{H}_\mathrm{H}$, sledi $\mathrm{d}\hat{A}_\mathrm{H}/\mathrm{d}t = 0$, što znači da ni $\hat{A}_\mathrm{H}$ ne zavisi od vremena i da je veličina $A$ integral kretanja.

U slučaju konzervativnog sistema hamiltonijan $\hat{H}_\mathrm{S}$ ne zavisi od vremena i komutira sa odgovarajućim evolucionim operatorom $\hat{U}(t,t_0)$ koji je tada oblika (9.76). Odatle sledi $\hat{H}_\mathrm{H} = \hat{U}^{-1}\hat{H}_\mathrm{S}\hat{U} = \hat{H}_\mathrm{S}$, što znači da hamiltonijan konzervativnog sistema u Hajzenbergovoj slici takođe ne zavisi od vremena.

[14]Npr. komutaciona relacija među opservablama $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$, koja u Šredingerovoj slici glasi $[\hat{x}_\mathrm{S},\hat{p}_{x\mathrm{S}}] = i\hbar$, u Hajzenbergovoj slici ima analogan oblik $[\hat{x}_\mathrm{H}(t),\hat{p}_{x\mathrm{H}}(t)] = i\hbar$. Napomenimo, međutim, da poslednja relacija ne bi važila ako bi se opservable $\hat{x}_\mathrm{H}(t)$ i $\hat{p}_{x\mathrm{H}}(t)$ uzele u raz̆ičitim vremenskim trenucima.

### 9.3.6 Hajzenbergova slika i princip korespondencije

U prethodnom odeljku videli smo da se prelazak iz Šredingerove slike u Hajzenbergovu (i obratno) ostvaruje unitarnom transformacijom vektora stanja i opservabli pomoću operatora $\hat{U}^{-1}(t, t_0)$ (odnosno $\hat{U}(t, t_0)$). Prema tome, te dve slike predstavljaju dve ekvivalentne formulacije kvantne mehanike. Šredingerova slika se, međutim, zbog analogije talasne funkcije sa elektromagnetnim talasima pokazala pogodnijom i intuitivno prihvatljivijom, te se daleko više koristi. S druge strane, Hajzenbergova slika, s obzirom na to da su u njoj opservable nosioci evolucije sistema, bliža je opisu dinamike u klasičnoj mehanici.

U vezi sa gore navedenim, uočimo da Hajzenbergova jednačina (9.88) ima oblik analogan opštoj jednačini kretanja u Hamiltonovom formalizmu klasične mehanike

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}, \tag{9.92}$$

gde je $A$ neka fizička veličina, $H$ Hamiltonova funkcija posmatranog sistema koja zavisi od njegovih nezavisnih koordinata, konjugovanih impulsa i vremena, a $\{A, H\}$ Puasonova zagrada te dve varijable[15]. Ova analogija demonstrira važenje principa korespondencije (v. odeljak 1.2.4) između klasične i kvantne mehanike. Možemo reći da se Hajzenbergove jednačine kvantizacijom neposredno dobijaju iz klasičnih jednačina kretanja u Hamiltonovom formalizmu. Dakle, dinamičke promenljive kvantizacijom prelaze u operatore (opservable), a Puasonove zagrade u komutatore, tj.

$$\{A, H\} \to \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{H}], \tag{9.93}$$

što je prvi put prepoznato od strane Diraka i što predstavlja suštinu kanonske kvantizacije opisane u odeljku 6.3.6.

### 9.3.7 Interakciona slika

Često se dešava da zbog složenosti hamiltonijana Šredingerovu jednačinu, koja određuje dinamiku kvantnog sistema, nije moguće egzaktno rešiti. Problem obično nastaje zbog sprezanja različitih stepeni slobode kroz član u hamiltonijanu koji opisuje interakciju među delovima sistema. Hamiltonijan je tada pogodno napisati u obliku

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0(t) + \hat{V}(t), \tag{9.94}$$

gde je $\hat{H}_0$ deo hamiltonijana koji opisuje osnovnu strukturu sistema, a $\hat{V}$ operator interakcije. Na primer, $\hat{H}_0$ može biti hamiltonijan slobodnog sistema, a $\hat{V}$ operator interakcije tog sistema sa spoljašnjim poljem. Takođe, na ovaj način pogodno je predstaviti hamiltonijan višečestičnog sistema, pri čemu hamiltonijan $\hat{H}_0$ opisuje sistem u modelu neinteragujućih čestica, a operator $\hat{V}$ njihovu međusobnu interakciju. Ukoliko

[15] O jednačinama kretanja u Hamiltonovom formalizmu, Puasonovim zagradama i analogiji sa kvantnom mehanikom može se više pročitati u knjizi „Uvod u teorijsku fiziku, I deo, Teorijska mehanika” Đ. Mušickog (bibl. ref. 2.C.2), str. 114.

je rešenje Šredingerove jednačine za sistem bez interakcije poznato, a ta interakcija ima znatno manji uticaj na dinamiku sistema od člana $\hat{H}_0$, približno rešenje Šredingerove jednačine za sistem opisan ukupnim hamiltonijanom (9.94) može se odrediti koristeći teoriju stacionarnih ili vremenski zavisnih perturbacija, koje će biti detaljno opisane u glavama 10 i 13.

Nalaženje približnog rešenja Šredingerove jednačine, međutim, nije jedini razlog za predstavljanje ukupnog hamiltonijana u obliku (9.94). Naime, dodatna interakcija u odnosu na osnovnu strukturu kvantnog sistema predstavlja generator koji uzrokuje prelaze među svojstvenim stanjima hamiltonijana osnovne strukture, a operator $\hat{V}$, koji opisuje tu interakciju, koristi se za računanje verovatnoće tih prelaza. Tako npr. interakcija atoma sa elektromagnetnim poljem uzrokuje prelaze među stacionarnim stanjima atoma koji se manifestuju apsorpcijom ili emisijom fotona. U slučaju slabijih polja teorija vremenski zavisnih perturbacija daje adekvatan opis ovih prelaza.

Razlaganje (9.94) dalje omogućava da se iz kompletne evolucije kvantnog sistema izdvoji i prikaže samo promena usled dodatne interakcije. Ovo se postiže prelaskom u tzv. *interakcionu sliku*, poznatu i kao Dirakova slika, koja predstavlja intermedijarnu formulaciju između Šredingerove i Hajzenbergove slike. Dok u poslednje dve slike vremensku zavisnost nose vektori stanja, odnosno operatori fizičkih veličina, u interakcionoj slici vektori stanja nose deo evolucije koji je uzrokovan interakcijom, a opservable nose deo evolucije koji je uzrokovan osnovnom strukturom sistema.

Polazeći od Šredingerove slike, u interakcionu sliku može se preći na sličan način kao u Hajzenbergovu, dakle unitarnom transformacijom definisanom inverznim evolucionim operatorom. Razlika je u izboru evolucionog operatora. Za prelazak u interakcionu sliku koristi se operator $\hat{U}_0(t,t_0)$, koji opisuje evoluciju sistema bez interakcije i koji zadovoljava jednačinu

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{U}_0(t,t_0) = \hat{H}_0(t)\hat{U}_0(t,t_0). \tag{9.95}$$

Prema tome, može se reći da je interakciona slika Hajzenbergova slika u odnosu na hamiltonijan $\hat{H}_0$. Ako ovaj hamiltonijan ne zavisi od vremena, saglasno izrazu (9.76), odgovarajući evolucioni operator ima oblik $\hat{U}_0(t,t_0) = e^{-i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar}$.

Na osnovu gore rečenog, ako je $|\psi_S(t)\rangle$ vektor stanja u Šredingerovoj slici, odgovarajući vektor stanja u interakcionoj slici dobija se transformacijom

$$|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle = \hat{U}_0^{-1}(t,t_0)|\psi_S(t)\rangle. \tag{9.96}$$

Inverzna transformacija daje izraz $|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}_0(t,t_0)|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle$, uz koji Šredingerova jednačina (9.85) sa hamiltonijanom (9.94) uzima oblik

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[\hat{U}_0(t,t_0)|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle] = [\hat{H}_0(t) + \hat{V}(t)]\,\hat{U}_0(t,t_0)|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle, \tag{9.97}$$

odnosno

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}_0}{\mathrm{d}t}|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle &+ i\hbar\hat{U}_0(t,t_0)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle \\ &= \hat{H}_0(t)\hat{U}_0(t,t_0)|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle + \hat{V}(t)\hat{U}_0(t,t_0)|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle. \end{aligned} \tag{9.98}$$

Zahvaljujući jednačini (9.95), prvi članovi sa leve i desne strane jednakosti potiru se, nakon čega se jednakost svodi na

$$i\hbar\hat{U}_0(t,t_0)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle = \hat{V}\hat{U}_0(t,t_0)|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle. \tag{9.99}$$

Delujući inverznim operatorom $\hat{U}_0^{-1}(t,t_0)$ na obe strane jednakosti, dobijamo

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle = \hat{U}_0^{-1}(t,t_0)\hat{V}(t)\hat{U}_0(t,t_0)|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle, \tag{9.100}$$

odnosno

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle = \hat{V}_{\mathrm{int}}(t)|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle, \tag{9.101}$$

gde je $\hat{V}_{\mathrm{int}}(t) = \hat{U}_0^{-1}(t,t_0)\hat{V}(t)\hat{U}_0(t,t_0)$ operator interakcije $\hat{V}$ u interakcionoj slici.

Analogno operatoru interakcije, proizvoljna opservabla $\hat{A}$, data u Šredingerovoj slici, prevodi se u interakcionu sliku transformacijom

$$\hat{A}_{\mathrm{int}}(t) = \hat{U}_0^{-1}(t,t_0)\hat{A}_{\mathrm{S}}(t)\hat{U}_0(t,t_0). \tag{9.102}$$

Ako ovaj izraz diferenciramo po vremenu, na analogan način kao kod izvođenja (9.91) dobijamo jednačinu kretanja za opservablu $\hat{A}_{\mathrm{int}}(t)$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}_{\mathrm{int}}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_{\mathrm{int}}(t), \hat{H}_0^{\mathrm{int}}(t)] + \frac{\partial\hat{A}_{\mathrm{int}}}{\partial t}, \tag{9.103}$$

gde je $\partial\hat{A}_{\mathrm{int}}/\partial t = \hat{U}_0^{-1}(\mathrm{d}\hat{A}_{\mathrm{S}}/\mathrm{d}t)\hat{U}_0$, a $\hat{H}_0^{\mathrm{int}}(t)$ se dobija istom transformacijom iz $\hat{H}_0(t)$ kao operator $\hat{A}_{\mathrm{int}}(t)$ iz $\hat{A}_{\mathrm{S}}(t)$ (formula (9.102)). Uočimo da se u slučaju kada je $\hat{V} = 0$, tj. $\hat{H} = \hat{H}_0$, ova jednačina svodi na Hajzenbergovu jednačinu, što je očekivano pošto u tom slučaju interakciona slika prelazi u Hajzenbergovu sliku.

### 9.3.8 Integralni oblik zakona evolucije u interakcionoj slici. Dajsonov operator vremenskog uređenja. *S*-matrica

U prethodnom odeljku videli smo da vektor stanja u interakcionoj slici $|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle$ nosi deo evolucije koji je uzrokovan interakcijom i da je ta evolucija određena diferencijalnom jednačinom (9.101). Pokazaćemo kako se integracijom ove jednačine prelazi na integralni oblik zakona kretanja.

Izraz (9.96) za vektor $|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle$, koristeći izraz (9.86) i jednakost $|\psi_{\mathrm{S}}(t_0)\rangle = |\psi_{\mathrm{int}}(t_0)\rangle$, prelazi u oblik $|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle = \hat{U}_0^{-1}(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)|\psi_{\mathrm{int}}(t_0)\rangle$, odnosno

$$|\psi_{\mathrm{int}}(t)\rangle = \hat{S}(t,t_0)|\psi_{\mathrm{int}}(t_0)\rangle, \tag{9.104}$$

gde je

$$\hat{S}(t,t_0) = \hat{U}_0^{-1}(t,t_0)\hat{U}(t,t_0) \tag{9.105}$$

operator evolucije u interakcionoj slici ili *S-operator*.

Da bismo odredili $S$-operator za datu interakciju $\hat{V}$, prvo ćemo napisati jednačinu (9.101) u integralnoj formi

$$|\psi_{\rm int}(t)\rangle = |\psi_{\rm int}(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} {\rm d}t'\,\hat{V}_{\rm int}(t')\,|\psi_{\rm int}(t')\rangle. \tag{9.106}$$

Rešenje ove integralne jednačine, tj. vektor $|\psi_{\rm int}(t)\rangle$, može se dobiti metodom sukcesivnih iteracija, gde se svaka sledeća iteracija rešenja dobija zamenjujući vektor $|\psi_{\rm int}(t)\rangle$ na desnoj strani jednačine (9.106) prethodnom iteracijom. Pri tome se kao nulta iteracija rešenja uzima vektor $|\psi_{\rm int}(t_0)\rangle$. Prema tome, imamo

$$|\psi^{(0)}_{\rm int}(t)\rangle = |\psi_{\rm int}(t_0)\rangle, \tag{9.107}$$

$$\begin{aligned} |\psi^{(1)}_{\rm int}(t)\rangle &= |\psi_{\rm int}(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} {\rm d}t'\,\hat{V}_{\rm int}(t')|\psi^{(0)}_{\rm int}(t')\rangle \\ &= \left[1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} {\rm d}t'\,\hat{V}_{\rm int}(t')\right]|\psi_{\rm int}(t_0)\rangle, \end{aligned} \tag{9.108}$$

$$\begin{aligned} |\psi^{(2)}_{\rm int}(t)\rangle &= |\psi_{\rm int}(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} {\rm d}t_1\,\hat{V}_{\rm int}(t_1)|\psi^{(1)}_{\rm int}(t_1)\rangle \\ &= |\psi_{\rm int}(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} {\rm d}t_1\hat{V}_{\rm int}(t_1)\left[1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t_1} {\rm d}t_2\hat{V}_{\rm int}(t_2)\right]|\psi_{\rm int}(t_0)\rangle \\ &= \left[1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} {\rm d}t_1\,\hat{V}_{\rm int}(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} {\rm d}t_1\int_{t_0}^{t_1} {\rm d}t_2\hat{V}_{\rm int}(t_1)\hat{V}_{\rm int}(t_2)\right]|\psi_{\rm int}(t_0)\rangle, \end{aligned} \tag{9.109}$$

$$\vdots$$

$$\begin{aligned} |\psi^{(n)}_{\rm int}(t)\rangle = \Bigg[&1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} {\rm d}t_1\,\hat{V}_{\rm int}(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} {\rm d}t_1\int_{t_0}^{t_1} {\rm d}t_2\hat{V}_{\rm int}(t_1)\hat{V}_{\rm int}(t_2) + \cdots \\ &\frac{1}{(i\hbar)^n}\int_{t_0}^{t} {\rm d}t_1\int_{t_0}^{t_1} {\rm d}t_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}} {\rm d}t_n\hat{V}_{\rm int}(t_1)\hat{V}_{\rm int}(t_2)\cdots\hat{V}_{\rm int}(t_n)\Bigg]|\psi_{\rm int}(t_0)\rangle. \end{aligned} \tag{9.110}$$

Uočimo da je u ovim izrazima $t > t_1 > t_2 > \cdots > t_n$. Konačno, pretpostavljajući da iteracioni proces konvergira, dobijamo

$$|\psi_{\rm int}(t)\rangle = \lim_{n\to\infty}|\psi^{(n)}_{\rm int}(t)\rangle = \hat{S}(t,t_0)|\psi_{\rm int}(t_0)\rangle, \tag{9.111}$$

gde je

$$\hat{S}(t,t_0) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(i\hbar)^n}\int_{t_0}^{t} {\rm d}t_1\int_{t_0}^{t_1} {\rm d}t_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}} {\rm d}t_n\hat{V}_{\rm int}(t_1)\hat{V}_{\rm int}(t_2)\cdots\hat{V}_{\rm int}(t_n). \tag{9.112}$$

Izraz za $S$-operator može se napisati u simetričnom obliku koristeći *Dajsonov (Freeman Dyson) operator vremenskog uređenja* $\hat{T}$, čije delovanje je zadato relacijom

$$\begin{aligned} \hat{T}\left\{\hat{V}_{\rm int}(t_1)\hat{V}_{\rm int}(t_2)\cdots\hat{V}_{\rm int}(t_n)\right\} = \;&\hat{V}_{\rm int}(t_i)\hat{V}_{\rm int}(t_j)\cdots\hat{V}_{\rm int}(t_r), \\ &t_i > t_j > \cdots > t_r. \end{aligned} \tag{9.113}$$

**Teorema:** Primenjujući operator vremenskog uređenja $\hat{T}$ na integrande u svakom članu $\hat{S}^{(n)}$ beskonačnog reda koji čini razvoj od $\hat{S}(t, t_0)$, sve integracije se mogu izvršiti preko kompletnog intervala od $t_0$ do $t$. Međutim, kao rezultat simetrije integrala u odnosu na permutacije integracionih varijabli, ovako izračunat $n$-tostruki integral je $n!$ puta veći od traženog $n$-tog člana. Prema tome,

$$\begin{aligned} \hat{S}^{(n)} &= \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathrm{d}t_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} \mathrm{d}t_n \hat{V}_{\mathrm{int}}(t_1)\hat{V}_{\mathrm{int}}(t_2)\cdots \hat{V}_{\mathrm{int}}(t_n) \\ &= \frac{1}{n!} \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_2 \cdots \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_n \hat{T}\left\{\hat{V}_{\mathrm{int}}(t_1)\hat{V}_{\mathrm{int}}(t_2)\cdots \hat{V}_{\mathrm{int}}(t_n)\right\}. \end{aligned} \tag{9.114}$$

**Dokaz:** Teoremu ćemo dokazati matematičkom indukcijom.

(i) Prvo ćemo pokazati da jednakost (9.114) važi za $n = 2$. U tom cilju posmatrajmo dvostruki integral

$$I_2 = \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_2 \hat{T}\left\{\hat{V}_{\mathrm{int}}(t_1)\hat{V}_{\mathrm{int}}(t_2)\right\}. \tag{9.115}$$

U ovom slučaju operator vremenskog uređenja deluje na sledeći način

$$\hat{T}\left\{\hat{V}_{\mathrm{int}}(t_1)\hat{V}_{\mathrm{int}}(t_2)\right\} = \begin{cases} \hat{V}_{\mathrm{int}}(t_1)\hat{V}_{\mathrm{int}}(t_2), & \text{ako je } t_1 > t_2, \\ \hat{V}_{\mathrm{int}}(t_2)\hat{V}_{\mathrm{int}}(t_1), & \text{ako je } t_2 > t_1. \end{cases} \tag{9.116}$$

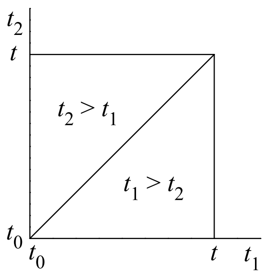
Oblast integracije može se podeliti na dva dela: $t_1 > t_2$ i $t_2 > t_1$ (slika 9.2). Tada je

$$I_2 = \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathrm{d}t_2 \hat{V}_{\mathrm{int}}(t_1)\hat{V}_{\mathrm{int}}(t_2) + \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_2 \int_{t_0}^{t_2} \mathrm{d}t_1 \hat{V}_{\mathrm{int}}(t_2)\hat{V}_{\mathrm{int}}(t_1). \tag{9.117}$$

Zamenjujući u drugom članu ovog izraza oznake za varijable $t_1$ i $t_2$, dobijamo

$$I_2 = 2\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathrm{d}t_2 \hat{V}_{\mathrm{int}}(t_1)\hat{V}_{\mathrm{int}}(t_2). \tag{9.118}$$

Prema tome, za $n = 2$ jednakost (9.114) je zadovoljena.




**Slika 9.2.** Oblasti integracije vremenski uređenog proizvoda operatora $\hat{V}_{\mathrm{int}}(t_1)$ i $\hat{V}_{\mathrm{int}}(t_2)$.

(ii) Pretpostavimo sada da jednakost (9.114) važi za proizvoljno $n$. Pokazaćemo da ova jednakost onda važi i za $n+1$. U tom cilju posmatrajmo razliku integrala

$$\begin{aligned} I(t) = &\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{V}_{\text{int}}(t')\hat{V}_{\text{int}}(t_1)\hat{V}_{\text{int}}(t_2)\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_n) \\ &- \frac{1}{(n+1)!}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t} dt_n \hat{T}\left\{\hat{V}_{\text{int}}(t')\hat{V}_{\text{int}}(t_1)\hat{V}_{\text{int}}(t_2)\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_n)\right\}. \end{aligned} \tag{9.119}$$

Očigledno, jednakost (9.114) biće zadovoljena ako je $I(t) = 0$. Uočimo da ovaj uslov sigurno važi ako je $t = t_0$. Naime, integral od $t_0$ do $t$ tada postaje integral sa jednakom donjom i gornjom granicom, pa neposredno sledi da je $I(t_0) = 0$. Prema tome, da bismo pokazali da je $I(t) = 0$, dovoljno je pokazati da $I$ ne zavisi od $t$, pošto je u tom slučaju $I(t) = I(t_0)$. Drugim rečima, dovoljno je pokazati da je $dI/dt = 0$.

Izračunaćemo vremenske izvode (po $t$) oba višestruka integrala u izrazu za $I(t)$. Pošto je izvod jednostrukog integrala čija je gornja granica $t$ jednak vrednosti podintegralne funkcije u tački $t$, tj. $(d/dt)\int_{t_0}^{t} f(t')\,dt' = f(t)$, izvod prvog višestrukog integrala glasi

$$\begin{aligned} &\frac{d}{dt}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{V}_{\text{int}}(t')\hat{V}_{\text{int}}(t_1)\hat{V}_{\text{int}}(t_2)\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_n) \\ &\quad = \hat{V}_{\text{int}}(t)\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{V}_{\text{int}}(t_1)\hat{V}_{\text{int}}(t_2)\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_n). \end{aligned} \tag{9.120}$$

Faktor $\hat{V}_{\text{int}}(t)$, koji se nakon diferenciranja pojavio umesto $\hat{V}_{\text{int}}(t')$, izvučen je ispred integrala jer njegov argument $t$ nije integraciona promenljiva.

Pošto se drugi višestruki integral u $I(t)$ sastoji od $n+1$ jednostrukih integrala sa gornjom granicom $t$, njegovo diferenciranje daje sumu koja se sastoji od $n+1$ članova tipa

$$\begin{aligned} &\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t} dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t} dt_{i-1} \frac{d}{dt}\int_{t_0}^{t} dt_i \int_{t_0}^{t} dt_{i+1} \cdots \int_{t_0}^{t} dt_n \times \\ &\quad \hat{T}\left\{\hat{V}_{\text{int}}(t')\hat{V}_{\text{int}}(t_1)\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_{i-1})\hat{V}_{\text{int}}(t_i)\hat{V}_{\text{int}}(t_{i+1})\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_n)\right\} \\ &= \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t} dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t} dt_{i-1} \int_{t_0}^{t} dt_{i+1} \cdots \int_{t_0}^{t} dt_n \times \\ &\quad \hat{T}\left\{\hat{V}_{\text{int}}(t')\hat{V}_{\text{int}}(t_1)\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_{i-1})\hat{V}_{\text{int}}(t)\hat{V}_{\text{int}}(t_{i+1})\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_n)\right\}. \end{aligned} \tag{9.121}$$

Za gornju granicu $t$ važi $t > t'$ i $t > t_i$, $i = 1, \cdots, n$, pa imamo

$$\begin{aligned}
&\hat{T}\left\{\hat{V}_{\text{int}}(t')\hat{V}_{\text{int}}(t_1)\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_{i-1})\hat{V}_{\text{int}}(t)\hat{V}_{\text{int}}(t_{i+1})\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_n)\right\} \\
&= \hat{T}\left\{\hat{V}_{\text{int}}(t)\hat{V}_{\text{int}}(t')\hat{V}_{\text{int}}(t_1)\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_{i-1})\hat{V}_{\text{int}}(t_{i+1})\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_n)\right\} \\
&= \hat{V}_{\text{int}}(t)\hat{T}\left\{\hat{V}_{\text{int}}(t')\hat{V}_{\text{int}}(t_1)\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_{i-1})\hat{V}_{\text{int}}(t_{i+1})\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_n)\right\},
\end{aligned} \tag{9.122}$$

odakle sledi da su svih $n + 1$ izraza (9.121) međusobno jednaki. Preimenovanjem $n$ integracionih promenljivih u svakom od njih u niz $t_1, \cdots, t_n$ izvod drugog višestrukog integrala u $I(t)$ glasi

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_2\cdots\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_n\hat{T}\left\{\hat{V}_{\text{int}}(t')\hat{V}_{\text{int}}(t_1)\hat{V}_{\text{int}}(t_2)\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_n)\right\}\right] \\
&= (n+1)\hat{V}_{\text{int}}(t)\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}\mathrm{d}t_n\hat{T}\left\{\hat{V}_{\text{int}}(t_1)\hat{V}_{\text{int}}(t_2)\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_n)\right\}.
\end{aligned} \tag{9.123}$$

Pošto je pretpostavka da za dato $n$ važi jednakost (9.114), sledi da je rezultat (9.123), nakon što se podeli sa $(n + 1)!$, jednak rezultatu (9.120), odakle neposredno sledi da je $\mathrm{d}I/\mathrm{d}t = 0$, odnosno $I = 0$, čime je teorema dokazana.

Koristeći navedenu teoremu, možemo pisati

$$\begin{aligned}
\hat{S}(t, t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{1}{(i\hbar)^n}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_2\cdots\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_n\hat{T}\left\{\hat{V}_{\text{int}}(t_1)\hat{V}_{\text{int}}(t_2)\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_n)\right\} \\
&= \hat{T}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{1}{(i\hbar)^n}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_2\cdots\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_n\hat{V}_{\text{int}}(t_1)\hat{V}_{\text{int}}(t_2)\cdots\hat{V}_{\text{int}}(t_n) \\
&= \hat{T}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\hat{V}_{\text{int}}(t')\right]^n = \hat{T}\exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\hat{V}_{\text{int}}(t')\right].
\end{aligned} \tag{9.124}$$

Ako izaberemo da $t_0 \to -\infty$, odgovarajući $S$-operator, tzv. *S-matrica*,

$$\hat{S}(t) \equiv \hat{S}(t, -\infty) = \hat{T}\exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'\hat{V}_{\text{int}}(t')\right] \tag{9.125}$$

određuje stanje sistema u interakcionoj slici u proizvoljnom trenutku polazeći od stanja sistema daleko pre uključenja interakcije, tj.

$$|\psi_{\text{int}}(t)\rangle = \hat{S}(t)|\psi_{\text{int}}(-\infty)\rangle. \tag{9.126}$$

Ovako definisana $S$-matrica ima primenu u kvantnoj statističkoj fizici i kvantnoj teoriji polja. S druge strane, u teoriji rasejanja uvodi se *matrica rasejanja* (engl. *scattering matrix*) $\hat{S} \equiv \hat{S}(-\infty, +\infty)$, koja prevodi stanje $|\psi_{\text{int}}(-\infty)\rangle$ u stanje $|\psi_{\text{int}}(+\infty)\rangle$.

### 9.3.9 Relacija neodređenosti vremena i energije

U uvodnoj glavi prvog dela ovog kursa (Kvantna mehanika 1) diskutovali smo princip neodređenosti i uveli relacije neodređenosti (1.29) za koordinate i njima konjugovane impulse (odeljci 1.4.3 i 1.4.4). Kasnije, kada je neodređenost fizičke veličine precizno definisana kao njena standardna devijacija (kvadratni koren iz srednjeg kvadratnog odstupanja od srednje vrednosti, izraz (3.49)), mogli smo ove relacije i formalno da izvedemo (relacije (3.180)) polazeći od odgovarajućih komutacionih relacija. Štaviše, dobijena je relacija neodređenosti (3.179) za proizvoljne fizičke veličine $A$ i $B$, koja se može napisati u obliku

$$\Delta A\,\Delta B \geq \frac{1}{2}\,|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle|, \tag{9.127}$$

gde su $\Delta A$ i $\Delta B$ neodređenosti, a $\hat{A}$ i $\hat{B}$ opservable pridružene tim veličinama.

Empirijsko iskustvo stečeno od početaka izgradnje kvantne mehanike ukazuje da za vreme i energiju takođe važi relacija neodređenosti koja je, po analogiji sa relacijama (1.29), oblika

$$\Delta t\,\Delta E \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{9.128}$$

Međutim, za razliku od relacija (1.29), ova relacija ne proizilazi neposredno iz opšte relacije (9.127). Razlog za to je činjenica da u kvantnoj mehanici vreme nije opservabla već parametar, što znači da u slučaju $A = t$ i $B = E$ opservabla $\hat{A}$ i komutator $[\hat{A},\hat{B}]$ (pri čemu je $\hat{B} = \hat{H}$) nisu definisani. Saglasno tome, i fizička interpretacija relacije (9.128) bitno je drugačija od interpretacije relacija neodređenosti koordinate i impulsa. Pre svega, $t$ i $E$ ovde nisu dve fizičke veličine koje se „istovremeno” mere, a neodređenost $\Delta t$ nije standardna devijacija rezultata merenja vremena. U nastavku ćemo pokazati kako se relacija (9.128) posredno dobija iz opšte relacije (9.127) i šta je fizičko značenje neodređenosti vremena.

Razmotrimo simultano merenje fizičke veličine $A$ i energije u proizvoljnom stanju kvantnog sistema. Relacija (9.127) u tom slučaju ima oblik

$$\Delta A\,\Delta E \geq \frac{1}{2}\,|\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle|. \tag{9.129}$$

Ako opservabla $\hat{A}$ ne zavisi eksplicitno od vremena, zakon kretanja za njenu srednju vrednost (jednačina (9.84)) glasi $i\hbar\,\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle/\mathrm{d}t = \langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle$, pa se relacija (9.129) može napisati u obliku

$$\frac{\Delta A}{|\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle/\mathrm{d}t|}\,\Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \tag{9.130}$$

ili

$$\tau_A\,\Delta E \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{9.131}$$

gde je

$$\tau_A = \frac{\Delta A}{|\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle/\mathrm{d}t|}. \tag{9.132}$$

Veličina $\tau_A$ predstavlja vreme potrebno da se srednja vrednost statističke raspodele rezultata merenja veličine $A$ promeni za iznos jednak širini raspodele $\Delta A$ i naziva se karakteristično vreme za evoluciju statističke raspodele veličine $A$. Kratko rečeno, $\tau_A$ je vreme potrebno da se ova statistička raspodela značajno promeni.

Označimo sa $\Delta t$ najkraće od svih karakterističnih vremena za različite fizičke veličine. To vreme se može smatrati karakterističnim vremenom za evoluciju samog sistema. Relacija (9.131), naravno, važi i za najkraće karakteristično vreme i pišemo je u obliku (9.128).

Primera radi, razmotrimo specijalni slučaj kada je sistem u stacionarnom stanju $|\psi\rangle$. Koristeći svojstvenu jednakost $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, dobijamo da za proizvoljnu opservablu $\hat{A}$ važi $\langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle = \langle\psi|\hat{A}\hat{H}|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{H}\hat{A}|\psi\rangle = E\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle - E\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = 0$. Zamenjujući ovaj rezultat u zakon kretanja za srednju vrednost opservable $\hat{A}$ koja ne zavisi eksplicitno od vremena, biće $\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle/\mathrm{d}t = 0$. Tada iz izraza (9.132) sledi da $\tau_A \to \infty$, a na osnovu toga i $\Delta t \to \infty$. Prema tome, ako se sistem nalazi u stacionarnom stanju, srednja vrednost fizičke veličine ne menja se u toku vremena. S druge strane, u stacionarnom stanju energija sistema ima određenu vrednost, tj. $\Delta E = 0$, što je preko relacije (9.131) saglasno sa rezultatom za $\Delta t$.

Navedimo na kraju da se relaciji neodređenosti vremena i energije može pripisati još jedno tumačenje. Zbog mogućnosti prelaza među stanjima kvantnog sistema apsorpcijom, odnosno emisijom jednog ili više kvanata energije (npr. fotona), sva pobuđena stanja sistema nestabilna su i nužno se pre ili kasnije deekscituju do osnovnog stanja. Pokazalo se da stanje koje postoji ograničeno vreme ne može imati tačno određenu energiju. Empirijska činjenica je da vreme života $\tau$ kvantnog stanja i širina odgovarajućeg energijskog nivoa $\Delta E$ zadovoljavaju relaciju

$$\tau\Delta E \sim \hbar. \tag{9.133}$$

Dakle, stanja sa manjom širinom nivoa žive duže (sporije se raspadaju), dok stanja sa većom širinom nivoa žive kraće (raspadaju se brže). Naglasimo da se ovde, za razliku od stabilnih sistema, ne radi o promeni statističke raspodele rezultata merenja fizičke veličine, već o apsorpciji ili emisiji zračenja. Zato karakteristično vreme $\tau$ ima drugo tumačenje, a to je vreme života kvantnog stanja.

# 10 Približni metodi

## 10.1 Značaj i vrste približnih metoda u kvantnoj mehanici

Približni metodi predstavljaju važan alat u kvantnoj mehanici jer se pokazalo da se mali broj problema od interesa za fiziku može rešiti egzaktno. Ti egzaktno rešivi problemi uglavnom se odnose na konzervativne sisteme sa jednim stepenom slobode ili na separabilne sisteme koji se mogu razložiti na podsisteme sa jednim stepenom slobode, pri čemu je potrebno da hamiltonijan ima dovoljno jednostavan oblik da je moguće dobijanje analitičkog rešenja njegovog svojstvenog problema (vremenski nezavisne Šredingerove jednačine). Neke od tih problema rešavali smo u prethodnim glavama (čestica u potencijalima pravougaonog oblika, harmonijski oscilator, čvrsti rotator, čestica u centralnosimetričnom potencijalu). Međutim, i ovi rešivi problemi predstavljaju idealizovane modele realnih fizičkih sistema, pa se često javlja potreba za nalaženjem određenih popravki (korekcija) na dobijene rezultate. Druga važna primena približnih metoda, pre svega teorije vremenski zavisnih perturbacija, je proučavanje prelaza između stanja kvantnog sistema.

Približni metodi koji se koriste u kvantnoj mehanici mogu se svrstati u tri glavne grupe: perturbacioni, varijacioni i semiklasični (kvaziklasični) metodi. Perturbacioni metod je primenljiv ako se hamiltonijan sistema može predstaviti u obliku (9.94), tj. kao zbir neperturbovanog hamiltonijana, čiji je svojstveni problem egzaktno rešiv, i perturbacije koja je u odnosu na neperturbovani hamiltonijan „mali" operator (značenje će biti objašnjeno u narednom odeljku). U tom slučaju rešenja svojstvenog problema ukupnog hamiltonijana mogu se predstaviti u obliku stepenog reda po perturbaciji. U ovoj glavi bavićemo se teorijom stacionarnih perturbacija, dok će teorija vremenski zavisnih perturbacija biti predstavljena u glavi 13. U narednim poglavljima posebno ćemo razmotriti slučajeve kada je posmatrani energijski nivo neperturbovanog hamiltonijana nedegenerisan i kada je on degenerisan.

Ukoliko se hamiltonijan sistema čiji svojstveni problem nije egzaktno rešiv ne može predstaviti u obliku (9.94), ali postoji ideja o obliku talasne funkcije koja je rešenje problema, koristi se varijacioni metod koji je pogodan za nalaženje osnovnog stanja i nižih pobuđenih stanja. Suštinski korak u ovom metodu je konstrukcija probne talasne funkcije koja zavisi od jednog ili više parametara čije se najoptimalnije vrednosti određuju pomoću uslova minimuma energije. Varijacioni metod se pokazao vrlo efikasnim ako se probna talasna funkcija dobro odabere. Nedostatak metoda je u tome što ne postoji pouzdan način za procenu greške.

Konačno, u slučaju velikih kvantnih brojeva i malih talasnih dužina dobre rezultate daju semiklasični metodi. Najpoznatiji među njima je Vencel-Kramers-Briluenov metod (Gregor Wentzel, Hendrik Kramers, Léon Brillouin), poznat kao WKB aproksimacija, koji je primenljiv na sisteme sa jednim stepenom slobode ili na separabilne višedimenzione sisteme. Uopštenje ovog metoda na višedimenzione integrabilne sisteme je Ajnštajn-Briluen-Kelerov metod (Albert Einstein, Léon Brillouin, Joseph Keller), tzv. EBK ili torus kvantizacija.

## 10.2 Teorija perturbacija nedegenerisanog nivoa

Neka je $\hat{H}$ hamiltonijan konzervativnog sistema sa diskretnim energijskim spektrom, čiji svojstveni problem

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{10.1}$$

nije egzaktno rešiv, i neka se $\hat{H}$ može napisati u obliku sume *neperturbovanog hamiltonijana* $\hat{H}_0$, čiji je svojstveni problem egzaktno rešiv, i *perturbacije* $\hat{V}$, dakle

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}. \tag{10.2}$$

Pretpostavljamo da je perturbacija u odnosu na neperturbovani hamiltonijan mali operator, što znači da su matrični elementi perturbacije $\hat{V}$ po apsolutnoj vrednosti mnogo manji od matričnih elemenata hamiltonijana $\hat{H}_0$. U cilju nalaženja približnih rešenja svojstvenog problema (10.1) kao popravki različitog reda na svojstvene energije i stanja neperturbovanog hamiltonijana, perturbaciju je pogodno napisati u obliku $\lambda\hat{V}$, gde je $\lambda \in (0, 1)$ bezdimenzioni parametar. Prema tome, ukupni (perturbovani) hamiltonijan pišemo u obliku

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}. \tag{10.3}$$

### 10.2.1 Svojstveni problem ukupnog hamiltonijana u bazisu neperturbovanog hamiltonijana

Pretpostavimo da su nam poznata sva svojstvena stanja (funkcije) $\psi_n^{(0)}$ i odgovarajuće nedegenerisane svojstvene energije $E_n^{(0)}$ neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$, tj. da je rešen svojstveni problem

$$\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}. \tag{10.4}$$

Pošto skup svih funkcija $\psi_n^{(0)}$ predstavlja svojstveni bazis operatora $\hat{H}_0$ u prostoru stanja sistema[1], proizvoljno stanje $\psi$, uključujući i svojstvena stanja hamiltonijana $\hat{H}$, mogu se razviti po stanjima $\psi_n^{(0)}$, dakle

$$\psi = \sum_m c_m\psi_m^{(0)}. \tag{10.5}$$

[1]Kvantna stanja ovde ćemo predstavljati talasnim funkcijama ne navodeći, radi jednostavnosti, njihove argumente. Ovakav zapis nam dozvoljava da oznake za funkcije (npr. $\psi$) posmatramo i kao vektore stanja, tj. nije preferirano da li je prostor stanja neki funkcionalni ili apstraktni Hilbertov prostor.

Svojstveni problem (10.3) tada se može napisati u obliku

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{V}) \sum_m c_m \psi_m^{(0)} = E \sum_m c_m \psi_m^{(0)}, \tag{10.6}$$

a pošto su $\psi_m^{(0)}$ svojstvene funkcije neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$, imamo

$$\sum_m c_m (E_m^{(0)} + \lambda\hat{V}) \psi_m^{(0)} = E \sum_m c_m \psi_m^{(0)}. \tag{10.7}$$

Množeći ovaj izraz skalarno sa leve strane proizvoljnim elementom bazisa $\psi_k^{(0)}$, sledi

$$\sum_m c_m (E_m^{(0)} \underbrace{\langle \psi_k^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle}_{\delta_{km}} + \lambda \langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_m^{(0)} \rangle) = E \sum_m c_m \underbrace{\langle \psi_k^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle}_{\delta_{km}}, \tag{10.8}$$

odnosno $E_k^{(0)} c_k + \lambda \sum_m \langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_m^{(0)} \rangle c_m = E c_k$. Pošto je broj funkcija $\psi_k^{(0)}$ koje čine svojstveni bazis neperturbovanog hamiltonijana neograničen, za ceo skup funkcija (tj. za sve vrednosti indeksa $k$) dobija se beskonačan sistem algebarskih jednačina

$$(E - E_k^{(0)}) c_k = \lambda \sum_m V_{km} c_m, \tag{10.9}$$

gde su $V_{km} = \langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_m^{(0)} \rangle$ matrični elementi operatora perturbacije, a energija $E$ i koeficijenti razvoja $c_m$ su nepoznate. Rešavanje beskonačnog sistema (10.9), naravno, nije izvodljivo, ali redukcijom na konačan ali dovoljno veliki sistem jednačina i primenom numeričkih metoda mogu se dobiti rešenja, tj. svojstvene energije $E$ i odgovarajući koeficijenti razvoja $c_n$, a time i svojstvene funkcije $\psi$, sa unapred zadanom tačnošću (tzv. dijagonalizacija hamiltonijana $\hat{H}$ u ograničenom bazisu).

### 10.2.2 Razvoj rešenja u stepeni red po parametru $\lambda$

Alternativa numeričkom načinu rešavanja je perturbativni prilaz, gde se rešenja sistema jednačina (10.9) traže u obliku razvoja u stepeni red po parametru $\lambda$

$$E = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots, \tag{10.10}$$

$$c_m = c_m^{(0)} + \lambda c_m^{(1)} + \lambda^2 c_m^{(2)} + \cdots. \tag{10.11}$$

Posmatrajmo sada *nedegenerisani* energijski nivo $E_n^{(0)}$ i odgovarajuću svojstvenu funkciju $\psi_n^{(0)}$ neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$. Cilj nam je da odredimo svojstveno stanje $\psi$ hamiltonijana $\hat{H}$ koje u nultoj aproksimaciji prelazi u $\psi_n^{(0)}$, tj. za koje važi $\lim_{\lambda\to 0} \psi = \psi_n^{(0)}$. Pošto je na osnovu razvoja (10.5) i (10.11) $\lim_{\lambda\to 0} \psi = \lim_{\lambda\to 0} \sum_m c_m \psi_m^{(0)} = \sum_m c_m^{(0)} \psi_m^{(0)}$, sledi $\sum_m c_m^{(0)} \psi_m^{(0)} = \psi_n^{(0)}$, odakle proizilazi da je

$$c_m^{(0)} = \delta_{mn}. \tag{10.12}$$

Zamenjujući razvoje (10.10) i (10.11) u sistem jednačina (10.9), sledi

$$
\begin{gathered}
(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots - E_k^{(0)})(\delta_{kn} + \lambda c_k^{(1)} + \lambda^2 c_k^{(2)} + \cdots) = \\
\lambda \sum_m V_{km}(\delta_{mn} + \lambda c_m^{(1)} + \lambda^2 c_m^{(2)} + \cdots).
\end{gathered} \tag{10.13}
$$

Grupišući članove uz isti stepen parametra $\lambda$, dobijamo

$$
\begin{gathered}
(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})\delta_{kn} + \lambda[(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})c_k^{(1)} + E_n^{(1)}\delta_{kn}] + \\
\lambda^2[(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})c_k^{(2)} + E_n^{(1)}c_k^{(1)} + E_n^{(2)}\delta_{kn}] + \cdots = \sum_m V_{km}(\lambda\,\delta_{mn} + \lambda^2 c_m^{(1)} + \cdots).
\end{gathered} \tag{10.14}
$$

Izjednačavajući koeficijente uz isti stepen parametra $\lambda$, sledi

$$
(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})\delta_{kn} = 0, \tag{10.15}
$$

$$
(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})c_k^{(1)} + E_n^{(1)}\delta_{kn} = \sum_m V_{km}\delta_{mn} = V_{kn}, \tag{10.16}
$$

$$
(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})c_k^{(2)} + E_n^{(1)}c_k^{(1)} + E_n^{(2)}\delta_{kn} = \sum_m V_{km}c_m^{(1)}, \tag{10.17}
$$

$$
\cdots .
$$

Uočimo da prva jednačina predstavlja identitet i u slučaju $k = n$ i kada je $k \neq n$. Iz ostalih jednačina dobijaju se korekcije različitog reda na energije i koeficijente razvoja.

### 10.2.3 Korekcije prvog reda na energije i stanja

Jednačina (10.16) u slučaju $k = n$ svodi se na

$$
E_n^{(1)} = V_{nn} \equiv \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle, \tag{10.18}
$$

a u slučaju $k \neq n$ daje

$$
c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \tag{10.19}
$$

Ovo su *popravke prvog reda* na energiju i koeficijente razvoja talasne funkcije koje se javljaju u razvojima (10.10) i (10.11). Uočimo da je popravka prvog reda na energiju jednaka srednjoj vrednosti perturbacije $\hat{V}$ u stanju neperturbovanog hamiltonijana koje odgovara datom nedegenerisanom energijskom nivou $E_n^{(0)}$.

Tada u okviru *teorije perturbacija prvog reda*, gde se uzimaju samo korekcije prvog reda, svojstvena energija $E$ hamiltonijana (10.3), koja u slučaju $\lambda \to 0$ konvergira svojstvenoj energiji $E_n^{(0)}$ neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$, iznosi

$$
E = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} = E_n^{(0)} + \lambda V_{nn}. \tag{10.20}
$$

Odgovarajuća talasna funkcija u okviru teorije perturbacija prvog reda dobija se koristeći izraz za koeficijente (10.19). Međutim, ovaj izraz, pošto ne važi za $k = n$, ne određuje koeficijent $c_n^{(1)}$. Taj koeficijent se dobija iz uslova normiranja funkcije $\psi$ na jedinicu. Polazeći od razvoja (10.5) i uslova (10.12), u okviru teorije perturbacija prvog reda imamo

$$\begin{aligned}\psi &= \sum_m (\delta_{mn} + \lambda c_m^{(1)})\psi_m^{(0)} = \psi_n^{(0)} + \lambda \sum_m c_m^{(1)}\psi_m^{(0)} \\ &= (1 + \lambda c_n^{(1)})\psi_n^{(0)} + \lambda \sum_{m\neq n} c_m^{(1)}\psi_m^{(0)},\end{aligned} \tag{10.21}$$

odakle se, s obzirom na ortonormiranost skupa funkcija $\psi_m^{(0)}$, dobija

$$\|\psi\|^2 = 1 + \lambda\,(c_n^{(1)} + c_n^{(1)*}) + O(\lambda^2). \tag{10.22}$$

Koristeći uslov normiranja $\|\psi\|^2 = 1$ i izjednačavajući članove koji stoje uz isti stepen parametra $\lambda$, sledi $c_n^{(1)} + c_n^{(1)*} = 0$, odnosno $\mathrm{Re}\, c_n^{(1)} = 0$. Zbog proizvoljnosti faze može se izabrati da koeficijent $c_n^{(1)}$ bude realan, što znači da je

$$c_n^{(1)} = 0. \tag{10.23}$$

U tom slučaju svojstvena funkcija $\psi$ hamiltonijana (10.3), koja se dobija korekcijom svojstvene funkcije $\psi_n^{(0)}$ neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$, u okviru teorije perturbacija prvog reda glasi

$$\psi^{(\mathrm{I})} = \psi_n^{(0)} + \lambda \sum_{m\neq n} c_m^{(1)}\psi_m^{(0)} = \psi_n^{(0)} + \lambda \sum_{m\neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\,\psi_m^{(0)}. \tag{10.24}$$

### 10.2.4 Korekcije drugog reda na energije i stanja

Jednačina (10.17) u slučaju $k = n$ svodi se na $E_n^{(1)} c_n^{(1)} + E_n^{(2)} = \sum_m V_{nm}\, c_m^{(1)}$. Koristeći izraz (10.19) i fazni izbor (10.23), sledi

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} V_{nm} c_m^{(1)} = \sum_{m\neq n} \frac{V_{nm} V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \tag{10.25}$$

Konačno, s obzirom na to da je $V_{nm}^* = V_{mn}$, imamo

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \tag{10.26}$$

Ovaj izraz predstavlja *popravku drugog reda* na energiju nedegenerisanog nivoa $E_n^{(0)}$. Uočimo da, ako se radi o osnovnom stanju, ova popravka uvek je negativna.

Ako je $k \neq n$, jednačina (10.17) ima oblik $(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})c_k^{(2)} + E_n^{(1)} c_k^{(1)} = \sum_m V_{km} c_m^{(1)}$, odakle sledi

$$c_k^{(2)} = -\frac{E_n^{(1)} c_k^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \sum_m V_{km} c_m^{(1)}. \tag{10.27}$$

Koristeći relacije (10.18), (10.19) i (10.23), dobija se

$$c_k^{(2)} = -\frac{V_{nn}V_{kn}}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})^2} + \sum_{m\neq n} \frac{V_{km}V_{mn}}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})}. \tag{10.28}$$

Polazeći od razvoja (10.5) i uslova (10.12), stanje $\psi$ u okviru *teorije perturbacija drugog reda* glasi $\psi = \sum_m(\delta_{mn} + \lambda c_m^{(1)} + \lambda^2 c_n^{(2)})\psi_m^{(0)}$. Tada, s obzirom na fazni izbor (10.23), imamo

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_n^{(0)} + \lambda \sum_{m\neq n} c_m^{(1)}\psi_m^{(0)} + \lambda^2 \sum_m c_m^{(2)}\psi_m^{(0)} \\ &= (1 + \lambda^2 c_n^{(2)})\psi_n^{(0)} + \lambda \sum_{m\neq n} c_m^{(1)}\psi_m^{(0)} + \lambda^2 \sum_{m\neq n} c_m^{(2)}\psi_m^{(0)}. \end{aligned} \tag{10.29}$$

Koeficijent $c_n^{(2)}$, analogno kao $c_n^{(1)}$ (v. odeljak 10.2.3), određuje se iz norme funkcije $\psi$. Koristeći ortonormiranost skupa funkcija $\psi_m^{(0)}$, dobija se

$$\|\psi\|^2 = 1 + \lambda^2(c_n^{(2)*} + c_n^{(2)}) + \lambda^2 \sum_{m\neq n} |c_m^{(1)}|^2 + O(\lambda^3). \tag{10.30}$$

Iz uslova normiranja $\|\psi\|^2 = 1$, izjednačavajući članove koji stoje uz $\lambda^2$, sledi $c_n^{(2)*} + c_n^{(2)} + \sum_{m\neq n} |c_m^{(1)}|^2 = 0$, odnosno

$$2\,\mathrm{Re}\, c_n^{(2)} + \sum_{m\neq n} |c_m^{(1)}|^2 = 0. \tag{10.31}$$

Ako izaberemo da koeficijent $c_n^{(2)}$ bude realan, biće $2c_n^{(2)} + \sum_{m\neq n} |c_m^{(1)}|^2 = 0$, tj.

$$c_n^{(2)} = -\frac{1}{2}\sum_{m\neq n} |c_m^{(1)}|^2 = -\frac{1}{2}\sum_{m\neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2}. \tag{10.32}$$

Napomenimo da se kod primene perturbacionog metoda obično polazi od hamiltonijana oblika (10.2), tako da se parametar $\lambda$ koji figuriše u izrazima za energije i stanja izostavlja (tačnije uzima se da $\lambda \to 1$, pošto se tako sa oblika (10.3) prelazi na oblik (10.2)). U tom slučaju, da bi teorija bila primenljiva, perturbacija $\hat{V}$ mora da bude mali operator. Kriterijum za to može se predstaviti u obliku

$$|V_{nm}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|, \quad \forall n \neq m. \tag{10.33}$$

Takođe, treba napomenuti da se u izrazima (10.24), (10.26), (10.28) itd., gde se javljaju sume po indeksu $m \neq n$, koje su u principu beskonačne, u praksi ograničavaju. Pri tome, zadržavaju se članovi u sumi koji odgovaraju nivoima $E_m^{(0)}$ koji su energijski bliži nivou $E_n^{(0)}$, jer je doprinos $m$-tog člana obrnuto proporcionalan razlici ovih energija.

### 10.2.5 Primer: Linearni harmonijski oscilator pod dejstvom konstantne spoljašnje sile

Kao primer konstantne sile izabraćemo silu koja deluje na naelektrisanu česticu u konstantnom homogenom električnom polju. Ako se čestica mase $m$ i naelektrisanja $q$ kreće u paraboličnom potencijalu i na nju istovremeno deluje pomenuta sila, hamiltonijan ovog sistema može se predstaviti u obliku (10.2), gde je $\hat{H}_0$ hamiltonijan linearnog harmonijskog oscilatora (7.30), dok je perturbacija $\hat{V}$ operator potencijalne energije čestice u električnom polju. Ako je polje usmereno u pravcu x-ose, a njegova jačina je $\mathcal{E}$, potencijal ima oblik $\hat{V} = -q\mathcal{E}\hat{x}$. Ukupni hamiltonijan tada glasi

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 - q\mathcal{E}\hat{x}. \tag{10.34}$$

Svojstveni problem hamiltonijana (10.34) može se rešiti egzaktno ako ga napišemo u obliku

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{x} - x_0)^2 - \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}, \tag{10.35}$$

gde je $x_0 = q\mathcal{E}/(m\omega^2)$. Prema tome, ukupni potencijal u kome se čestica nalazi je parabolični potencijal sa istom karakterističnom frekvencijom $\omega$, ali sa minimumom u tački $x_0$ i vrednošću $-q^2\mathcal{E}^2/(2m\omega^2)$ u toj tački (referentni nivo). Pošto energijski nivoi oscilatora ne zavise od $x_0$, već samo od frekvencije $\omega$ i referentnog nivoa, nivoi oscilatora koji je pod dejstvom navedene sile imaju vrednosti

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}. \tag{10.36}$$

Svojstvene funkcije $\psi_n(x)$ hamiltonijana (10.35) mogu se dobiti aktivnom prostornom translacijom svojstvenih funkcija $\phi_n(x)$ hamiltonijana linearnog harmonijskog oscilatora $\hat{H}_0$ za $x_0$, tj. $\psi_n(x) = \phi_n(x - x_0)$. Za to ćemo iskoristiti operator translacije definisan izrazom (7.2), koji ćemo razviti u red i u kome ćemo operator impulsa izraziti preko operatora kreacije i anihilacije (izraz (7.68)), a zatim primeniti relacije (7.51) i (7.52). Dakle

$$\begin{aligned}
\psi_n(x) &= \phi_n(x - x_0) = \langle x - x_0|n\rangle = \langle x|\hat{U}(x_0)|n\rangle \\
&= \langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}x_0\hat{p}_x}|n\rangle = \langle x|\left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar}x_0\hat{p}_x + \cdots\right)|n\rangle \\
&= \langle x|\left[\hat{I} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x_0(\hat{a}^+ - \hat{a}) + \cdots\right]|n\rangle \\
&= \langle x|n\rangle + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x_0\left(\sqrt{n+1}\,\langle x|n+1\rangle - \sqrt{n}\,\langle x|n-1\rangle\right) + \cdots \\
&= \phi_n(x) + \frac{q\mathcal{E}}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}\left[\sqrt{n+1}\,\phi_{n+1}(x) - \sqrt{n}\,\phi_{n-1}(x)\right] + \cdots .
\end{aligned} \tag{10.37}$$

Da bismo isti problem rešili perturbativnim putem, izračunaćemo matrične elemente perturbacije $\hat{V}$ u bazisu svojstvenih stanja hamiltonijana oscilatora (v. odeljak 8.4.3). Predstavljajući operator koordinate preko operatora kreacije i anihilacije (izraz (7.67)) i koristeći relacije (7.51) i (7.52), imamo

$$
\begin{aligned}
V_{nn'} &= -q\mathcal{E}\langle n|\hat{x}|n'\rangle = -q\mathcal{E}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\langle n|\hat{a}^{+}|n'\rangle + \langle n|\hat{a}|n'\rangle\right) \\
&= -q\mathcal{E}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n'+1}\,\delta_{n,n'+1} + \sqrt{n'}\,\delta_{n,n'-1}\right).
\end{aligned}
\tag{10.38}
$$

Uočimo da su svi dijagonalni matrični elementi jedaki nuli, što znači da je popravka prvog reda na energiju (10.18) za sva stacionarna stanja jednaka nuli

$$
E_n^{(1)} = V_{nn} = 0. \tag{10.39}
$$

Međutim, popravka drugog reda (10.26) različita je od nule

$$
\begin{aligned}
E_n^{(2)} &= \sum_{n'\neq n}\frac{|V_{nn'}|^2}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} = q^2\mathcal{E}^2\frac{\hbar}{2m\omega}\sum_{n'\neq n}\frac{\left|\sqrt{n'+1}\,\delta_{n,n'+1} + \sqrt{n'}\,\delta_{n,n'-1}\right|^2}{\hbar\omega(n-n')} \\
&= q^2\mathcal{E}^2\frac{\hbar}{2m\omega}\left(\frac{n}{\hbar\omega} - \frac{n+1}{\hbar\omega}\right) = -\frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}.
\end{aligned}
\tag{10.40}
$$

Konačno, energijski nivoi određeni primenom perturbacionog računa drugog reda glase

$$
E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}, \tag{10.41}
$$

što se poklapa sa tačnim svojstvenim energijama (10.36) ukupnog hamiltonijana.

Popravke prvog reda na koeficijente razvoja (10.19) su

$$
c_{n'}^{(1)} = \frac{V_{n'n}}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} = -\frac{q\mathcal{E}}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}\,\frac{\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}}{n-n'}. \tag{10.42}
$$

Prema tome, svojstvene funkcije hamiltonijana (10.34) u okviru teorije perturbacija prvog reda glase

$$
\psi_n = \phi_n + \sum_{n'\neq n} c_{n'}^{(1)}\phi_{n'} = \phi_n + \frac{q\mathcal{E}}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}\left(\sqrt{n+1}\,\phi_{n+1} - \sqrt{n}\,\phi_{n-1}\right), \tag{10.43}
$$

što se poklapa sa razvojem (10.37) do linearnog člana.

# 10.3 Teorija perturbacija degenerisanog nivoa

## 10.3.1 Razvoj rešenja po stanjima multipleta degenerisanog nivoa. Sekularna jednačina

Ako je neperturbovani energijski nivo degenerisan, što znači da tom nivou odgovara više različitih svojstvenih stanja neperturbovanog hamiltonijana (multiplet), teorija perturbacija izložena u prethodnom poglavlju više nije primenljiva. Naime, u imeniocima izraza za popravke figurišu razlike energija koje za bilo koja dva stanja iz istog multipleta postaju nule, zbog čega vrednosti pomenutih izraza za ta stanja nisu definisane.

Neka je $E_n^{(0)}$ neperturbovani diskretni energijski nivo koji je $g$ puta *degenerisan* i neka je ortonormirani skup stanja $\{\psi_{nk}^{(0)}, k = 1, 2, \ldots, g\}$ odgovarajući multiplet. Drugim rečima, $\psi_{nk}^{(0)}$ su rešenja svojstvenog problema neperturbovanog hamiltonijana[2]

$$\hat{H}_0 \psi_{nk}^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_{nk}^{(0)}, \quad k = 1, 2, \ldots, g, \tag{10.44}$$

takva da je $\langle \psi_{nk}^{(0)} | \psi_{nk'}^{(0)} \rangle = \delta_{kk'}, \forall k, k' = 1, 2, \ldots, g$.

Posmatrajmo sada perturbovani sistem čiji se hamiltonijan $\hat{H}$ može napisati u obliku sume neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$ i perturbacije $\hat{V}$. Ako se perturbacija postepeno uključuje (npr. koristeći oblik $\lambda\hat{V}$ i varirajući $\lambda$ od 0 do 1), multiplet $\{\psi_{nk}^{(0)}, k = 1, 2, \ldots, g\}$ prelazi u skup od $g$ svojstvenih stanja hamiltonijana $\hat{H}$, a degenerisani nivo $E_n^{(0)}$ (koji se može posmatrati kao skup jednakih energija članova multipleta) u skup od $g$ svojstvenih energija hamiltonijana $\hat{H}$. Pošto je promena energije pod dejstvom perturbacije u principu različita za različita stanja, proizilazi da se $g$ puta degenerisani nivo pod dejstvom perturbacije u opštem slučaju cepa na $g$ podnivoa. Prema tome, pod dejstvom perturbacije može doći do potpunog ili delimičnog uklanjanja degeneracije.

Neka je $E_i$ jedan od nivoa u koji neperturbovani energijski nivo $E_n^{(0)}$ prelazi pod dejstvom perturbacije $\hat{V}$ i neka je $\psi_i$ odgovarajuće svojstveno stanje od $\hat{H}$, tj.

$$\hat{H}\psi_i = E_i \psi_i. \tag{10.45}$$

Stanje $\psi_i$, analogno kao u teoriji perturbacija nedegenerisanog nivoa, može se razviti po svojstvenom bazisu neperturbovanog hamiltonijana. U ovom slučaju, međutim, dobri rezultati mogu se dobiti aproksimirajući stanje $\psi_i$ superpozicijom svojstvenih stanja od $\hat{H}_0$ iz multipleta koji odgovara degenerisanom nivou $E_n^{(0)}$, tj.

$$\psi_i \approx \sum_{k=1}^{g} c_k^{(i)} \psi_{nk}^{(0)}, \tag{10.46}$$

gde skup koeficijenata $\{c_k^{(i)}, k = 1, 2, \ldots, g\}$ odgovara stanju $\psi_i$. Objašnjenje za to moglo bi se naći u činjenici da u perturbacionom računu generalno stanja koja su

[2]Ukoliko skup rešenja svojstvenog problema (10.44) nije ortonormiran odmah po dobijanju, možemo ga naknadno ortonormirati Gram-Šmitovim postupkom.

energijski bliža posmatranom neperturbovanom nivou imaju veći udeo u popravkama. Shodno tome, u teoriji perturbacija degenerisanog nivoa najveći doprinos očekuje se od stanja multipleta koji odgovara posmatranom degenerisanom neperturbovanom nivou.

Zamenjujući razvoj (10.46) u jednačinu (10.45) sa hamiltonijanom (10.2), dobija se

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) \sum_k c_k^{(i)} \psi_{nk}^{(0)} = E_i \sum_k c_k^{(i)} \psi_{nk}^{(0)}. \tag{10.47}$$

Ulazeći operatorom $\hat{H}_0 + \hat{V}$ pod sumu i koristeći svojstvenu jednačinu (10.44), sledi

$$\sum_k c_k^{(i)} (E_n^{(0)} + \hat{V}) \psi_{nk}^{(0)} = E_i \sum_k c_k^{(i)} \psi_{nk}^{(0)}. \tag{10.48}$$

Zamenjujući u poslednjoj jednačini indeks $k$ sa $k'$ i množeći tu jednačinu skalarno sa leve strane proizvoljnim elementom multipleta $\psi_{nk}$, dobijamo

$$\sum_{k'} c_{k'}^{(i)} (E_n^{(0)} \langle \psi_{nk}^{(0)} | \psi_{nk'}^{(0)} \rangle + \langle \psi_{nk}^{(0)} | \hat{V} | \psi_{nk'}^{(0)} \rangle) = E_i \sum_{k'} c_{k'}^{(i)} \langle \psi_{nk}^{(0)} | \psi_{nk'}^{(0)} \rangle. \tag{10.49}$$

Koristeći ortogonalnost stanja multipleta, konačno imamo

$$\sum_{k'} [(E_n^{(0)} - E_i)\delta_{kk'} + V_{kk'}] c_{k'}^{(i)} = 0, \quad k = 1, \ldots, g, \tag{10.50}$$

gde su $V_{kk'} = \langle \psi_{nk}^{(0)} | \hat{V} | \psi_{nk'}^{(0)} \rangle$ matrični elementi perturbacije među stanjima multipleta. Pošto je dobijeni sistem od $g$ linearnih jednačina sa $g$ nepoznatih $c_{k'}^{(i)}$ homogen, on ima rešenje ako je determinanta sistema jednaka nuli, dakle

$$\det |(E_n^{(0)} - E_i)\delta_{kk'} + V_{kk'}| = 0. \tag{10.51}$$

Ovaj uslov u eksplicitnom obliku glasi

$$\begin{vmatrix} E_n^{(0)} - E_i + V_{11} & V_{12} & \ldots & V_{1g} \\ V_{21} & E_n^{(0)} - E_i + V_{22} & \ldots & V_{2g} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ V_{g1} & V_{g2} & \ldots & E_n^{(0)} - E_i + V_{gg} \end{vmatrix} = 0. \tag{10.52}$$

Razvijanjem ove determinante dobija se tzv. *sekularna jednačina* iz koje se određuju moguće vrednosti za energiju $E_i$.

Sekularna jednačina je algebarska jednačina $g$-tog reda po $E_i$, čiji su koreni, s obzirom da je $\hat{H}$ ermitski operator, realni. Ukoliko su svi koreni međusobno različiti, $g$ puta degenerisani nivo $E_n^{(0)}$ prelazi u $g$ nedegenerisanih nivoa $E_i$. Ako su, međutim, neki od tih korena jednaki (višestruki), degeneracija će biti uklonjena samo delimično. Kada se jednom nađu rešenja sekularne jednačine, tj. kada se odrede vrednosti svih $g$

energijskih nivoa $E_i$, za svaku vrednost posebno se rešava sistem jednačina (10.50) i tako se dobijaju odgovarajući koeficijenti $c_k^{(i)}$.

Napomenimo na kraju da homogen sistem od $g$ jednačina daje uvek $g-1$ nezavisnih rešenja, što znači da $g-1$ koeficijenata $c_k^{(i)}$ dobijenih rešavanjem sistema jednačina (10.50) zavise od jednog od njih. Preostali koeficijent dobija se iz uslova normiranja stanja $\psi_i$ na jedinicu ($\|\psi_i\|^2 = 1$) koji, kada se izrazi preko njih, glasi

$$\sum_{k=1}^{g} |c_k^{(i)}|^2 = 1. \tag{10.53}$$

## 10.3.2 Rešenje za dvostruko degenerisani nivo

Neka je $E_n^{(0)}$ neperturbovani diskretni energijski nivo koji je dva puta degenerisan i neka su $\psi_{n1}^{(0)}$ i $\psi_{n2}^{(0)}$ odgovarajuće svojstvene funkcije neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$. U tom slučaju približna rešenja svojstvenog problema ukupnog hamiltonijana (10.2) mogu se predstaviti u obliku linearne kombinacije

$$\psi_i = c_1^{(i)}\psi_{n1}^{(0)} + c_2^{(i)}\psi_{n2}^{(0)}, \quad i = 1, 2, \tag{10.54}$$

pri čemu se koeficijenti $c_1^{(i)}$ i $c_2^{(i)}$ dobijaju rešavanjem sistema jednačina (10.50) za $g = 2$ koji eksplicitno glasi

$$\begin{aligned} (E_n^{(0)} - E_i + V_{11})c_1^{(i)} + V_{12}c_2^{(i)} &= 0, \\ V_{21}c_1^{(i)} + (E_n^{(0)} - E_i + V_{22})c_2^{(i)} &= 0, \end{aligned} \tag{10.55}$$

gde su $V_{kk'} = \langle\psi_{nk}^{(0)}|\hat{V}|\psi_{nk'}^{(0)}\rangle$, $k, k' = 1, 2$. Ovaj sistem jednačina ima rešenje ako je determinanta sistema jednaka nuli, dakle ako je

$$\begin{vmatrix} E_n^{(0)} - E_i + V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & E_n^{(0)} - E_i + V_{22} \end{vmatrix} = 0. \tag{10.56}$$

Razvijanjem determinante dobija se sekularna jednačina

$$(E_n^{(0)} - E_i + V_{11})(E_n^{(0)} - E_i + V_{22}) - V_{12}V_{21} = 0, \tag{10.57}$$

koja se, koristeći osobinu $V_{21} = V_{12}^*$, može napisati u obliku

$$E_i^2 - (2E_n^{(0)} + V_{11} + V_{22})E_i + (E_n^{(0)} + V_{11})(E_n^{(0)} + V_{22}) - |V_{12}|^2 = 0. \tag{10.58}$$

Rešenja ove jednačine

$$E_{1,2} = E_n^{(0)} + \frac{V_{11} + V_{22}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{V_{11} - V_{22}}{2}\right)^2 + |V_{12}|^2} \tag{10.59}$$

su aproksimativne vrednosti svojstvenih energija ukupnog hamiltonijana $\hat{H}$ koje odgovaraju svojstvenim funkcijama (10.54).

Zamenjujući rezultat za $E_i$ u jednu od jednačina (10.55), npr. u prvu, dobijamo

$$\frac{c_2^{(i)}}{c_1^{(i)}} = \frac{E_i - H_{11}}{V_{12}} = \frac{V_{22} - V_{11}}{2V_{12}} \pm \sqrt{\left(\frac{V_{22} - V_{11}}{2V_{12}}\right)^2 + 1} = R \pm \sqrt{1 + R^2}, \qquad (10.60)$$

gde je $R = (V_{22} - V_{11})/(2V_{12})$. Odavde i iz uslova normiranja (10.53), koji u ovom slučaju glasi $|c_2^{(i)}|^2 + |c_1^{(i)}|^2 = 1$, sledi

$$c_1^{(i)} = \frac{1}{\sqrt{2\left(1 + R^2 \pm R\sqrt{1 + R^2}\right)}}, \quad c_2^{(i)} = (R \pm \sqrt{1 + R^2})c_1^{(i)}. \qquad (10.61)$$

Prema tome, aproksimativno rešenje za funkcije stanja koja odgovaraju energijskim nivoima (10.59) glasi

$$\psi_{1,2} = \frac{\psi_{n1}^{(0)} + \left(R \pm \sqrt{1 + R^2}\right)\psi_{n2}^{(0)}}{\sqrt{2\left(1 + R^2 \pm R\sqrt{1 + R^2}\right)}}. \qquad (10.62)$$

### 10.3.3 Primer: Linearni Štarkov efekt $n = 2$ nivoa atoma vodonika

Energijski nivo atoma vodonika sa vrednošću glavnog kvantnog broja $n = 2$ je četiri puta degenerisan u orbitnom prostoru stanja (formula (5.102)), a odgovarajuća stacionarna stanja predstavljena su talasnim funkcijama $\psi_{200}$, $\psi_{210}$, $\psi_{211}$ i $\psi_{21(-1)}$ (izraz (5.121) sa izrazima (5.119), (5.120) i (5.64)). Razmotrićemo cepanje ovog energijskog nivoa u spoljašnjem električnom polju, tzv. *Štarkov efekat* (Johannes Stark).

Uzimajući pravac polja za z-osu, operator potencijalne energije elektrona u električnom polju jačine $\mathcal{E}$ glasi[3]

$$\hat{V} = e\mathcal{E}\hat{z}. \qquad (10.63)$$

Posmatrajući ovaj operator kao perturbaciju u odnosu na neperturbovani hamiltonijan atoma $\hat{H}_0$ (izrazi (5.2) i (5.82) za $Z = 1$) i koristeći teoriju perturbacija degenerisanog nivoa, odredićemo energijske nivoe nastale cepanjem (ukidanjem degeneracije) neperturbovanog nivoa $E_2^{(0)}$ (formula (5.101) za $n = 2$). Za to je potrebno izračunati matrične elemente $V_{lm,l'm'} = e\mathcal{E}\langle\psi_{2lm}|z|\psi_{2l'm'}\rangle$ za navedena četiri stanja i formirati sekularnu jednačinu. Pokazuje se da su oni različiti od nule samo ako je $l = l' \pm 1$ i $m = m'$, tako da od svih matričnih elemenata sa ova četiri stanja samo su dva različita od nule i to $V_{00,10} = V_{10,00} = -3a_0e\mathcal{E}$. U tom slučaju uslov (10.52) svodi se na

$$\begin{vmatrix} E_2^{(0)} - E_i & V_{00,10} & 0 & 0 \\ V_{10,00} & E_2^{(0)} - E_i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2^{(0)} - E_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_n^{(0)} - E_i \end{vmatrix} = 0. \qquad (10.64)$$

[3] Izraz za potencijalnu energiju elektrona u električnom polju $\mathcal{E}$ u opštem slučaju glasi $\hat{V} = e\boldsymbol{\mathcal{E}}\cdot\hat{\mathbf{r}}$. Izračunavanje energije i stanja, međutim, najjednostavnije je ako se z-osa izabere u pravcu polja.

Razvijanjem determinante dobija se sekularna jednačina oblika

$$[(E_2^{(0)} - E_i)^2 - V_{00,10}^2](E_2^{(0)} - E_i) = 0, \tag{10.65}$$

čija rešenja su

$$E_{1,2} = E_2^{(0)} \pm 3a_0 e\mathcal{E}, \quad E_{3,4} = E_2^{(0)}. \tag{10.66}$$

Zamenjujući vrednosti ovih energija u jednačine za koeficijente, dobija se da su odgovarajuća perturbovana stanja $\psi_{1,2} = (\psi_{200} \pm \psi_{210})/\sqrt{2}$, $\psi_{3,4} = \psi_{21(\pm 1)}$. Zbog linearne zavisnosti nivoa $E_1$ i $E_2$ od $\mathcal{E}$, efekat se naziva *linearni Štarkov efekat*. Pokazuje se da se on javlja samo kod atoma vodonika zbog degeneracije njegovih energijskih nivoa. Kod drugih atoma cepanje nivoa dobija se tek u drugom redu teorije perturbacija i efekat se naziva *kvadratni Štarkov efekat*.

## 10.4 Varijacioni metod

Posebno pogodan metod za računanje osnovnog i prvih pobuđenih stanja kvantnog sistema, kada nije moguće egzaktno rešiti Šredingerovu jednačinu, jeste varijacioni metod. Za razliku od perturbacionog računa, ovaj metod ne zahteva prethodno rešavanje jednostavnijeg (neperturbovanog) problema, niti je potrebno da deo hamiltonijana zbog koga svojstveni problem nije egzaktno rešiv bude mali operator.

Varijacioni račun u opštem slučaju predstavlja postupak pomoću kojeg se variranjem funkcije, dakle menjanjem njenog oblika, nalazi oblik za koji neka izabrana veličina čija vrednost zavisi od te funkcije kao argumenta, tzv. funkcional, ima minimalnu vrednost. Primer primene varijacionog metoda u klasičnoj mehanici je izvođenje Lagranževih jednačina kretanja polazeći od principa najmanjeg dejstva.

### 10.4.1 Određivanje osnovnog stanja varijacionim metodom

Varijaciono izračunavanje osnovnog stanja zasniva se na sledećoj teoremi.

**Teorema:** Ako je $E_0$ energija osnovnog (najnižeg) stanja sistema opisanog hamiltonijanom $\hat{H}$, onda je

$$\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0, \tag{10.67}$$

gde je $\psi$ proizvoljno stanje. Znak jednakosti u ovoj relaciji važi ako i samo ako je $\psi$ osnovno stanje.

**Dokaz:** Neka su $\varphi_n$ normirane svojstvene funkcije, a $E_n$ odgovarajuće svojstvene energije hamiltonijana $\hat{H}$, dakle rešenja njegovog svojstvenog problema

$$\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n, \quad n = 0, 1, 2, \ldots, \tag{10.68}$$

pri čemu je $\langle\varphi_n|\varphi_{n'}\rangle = \delta_{nn'}$, i neka je redosled vrednosti indeksa (kvantnog broja) $n$ izabran tako da prati rast vrednosti energija $E_n$, tj.

$$E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \cdots. \tag{10.69}$$

Skup $\{\varphi_n, n = 0, 1, 2, \ldots\}$ predstavlja ortonormirani bazis po kome možemo razviti proizvoljno stanje $\psi = \sum_n c_n \varphi_n$, pri čemu su koeficijenti razvoja $c_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle$. U tom slučaju imamo $\langle \psi | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2$ i

$$\begin{aligned}\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle &= \sum_n \sum_{n'} c_n^* c_{n'} \langle \varphi_n | \hat{H} | \varphi_{n'} \rangle = \sum_n \sum_{n'} c_n^* c_{n'} E_{n'} \langle \varphi_n | \varphi_{n'} \rangle \\ &= \sum_n |c_n|^2 E_n \geq \sum_n |c_n|^2 E_0 = \langle \psi | \psi \rangle E_0.\end{aligned} \tag{10.70}$$

Deljenjem početnog i krajnjeg izraza sa $\langle \psi | \psi \rangle$ dobija se nejednakost (10.67). Ako je $\psi$ osnovno stanje, dakle svojstveno stanje hamiltonijana $\hat{H}$ sa najnižom energijom, koje je ovde predstavljeno normiranom funkcijom $\varphi_0$, neposredno sledi $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle = \langle \varphi_0 | \hat{H} | \varphi_0 \rangle = E_0 \langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle = E_0$. Obrnuto, ako je $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle = E_0$, koristeći prva tri koraka u izvođenju (10.70), imamo $\sum_n |c_n|^2 E_n = \langle \psi | \psi \rangle E_0$, odakle sledi $c_n \sim \delta_{n0}$, što zamenom u razvoj $\psi = \sum_n c_n \varphi_n$ daje $\psi \sim \varphi_0$.

U navedenoj teoremi srednja vrednost hamiltonijana može se posmatrati kao funkcional čiji je argument talasna funkcija $\psi$

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \tag{10.71}$$

i čija je minimalna vrednost jednaka energiji osnovnog stanja, tj. $\min E[\psi] = E_0$. Pošto minimum spada u stacionarne tačke, on se može odrediti iz uslova da varijacija ovog funkcionala u odnosu na sve varijacije funkcije $\psi$ bude jednaka nuli, tj.

$$\delta E[\psi] = 0, \quad \forall \delta\psi. \tag{10.72}$$

Ukoliko ovaj uslov ima više rešenja, neophodno je proveriti koje od njih odgovara apsolutnom minimumu.

Glavni problem kod primene varijacionog metoda jeste u tome što se variranje funkcije, umesto u celom prostoru stanja, vrši na nekom izabranom skupu funkcija za koji očekujemo da sadrži ili egzaktnu funkciju osnovnog stanja (čiji oblik nije unapred poznat) ili njenu dovoljno dobru aproksimaciju. U ovom drugom slučaju minimum funkcionala $E[\psi]$ predstavlja približnu vrednost energije $E_0$, a odgovarajuća funkcija $\psi$ približnu talasnu funkciju osnovnog stanja.

Skup funkcija koji čini domen za variranje obično se zadaje pomoću tzv. *probne funkcije* $\psi(\mathbf{r}; \alpha, \beta, \ldots)$, koja zavisi od određenog broja realnih parametara $\alpha, \beta, \ldots$ . U tom slučaju funkcional $E[\psi]$ postaje funkcija

$$E(\alpha, \beta, \ldots) = \frac{\int \psi(\mathbf{r}; \alpha, \beta, \ldots) \hat{H} \psi^*(\mathbf{r}; \alpha, \beta, \ldots) \, \mathrm{d}V}{\int |\psi(\mathbf{r}; \alpha, \beta, \ldots)|^2 \, \mathrm{d}V}, \tag{10.73}$$

a varijacioni uslov (10.72) svodi se na uslov ekstremuma ove funkcije po parametrima

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial \beta} = 0, \quad \ldots \, . \tag{10.74}$$

Neka su $\alpha_0, \beta_0, \ldots$ vrednosti parametara koje se dobijaju rešavanjem sistema jednačina (10.74). Ako je probna funkcija dobro izabrana, onda je izraz $E(\alpha_0, \beta_0, \ldots)$ jednak ili blizak energiji osnovnog stanja $E_0$, a funkcija $\psi(\mathbf{r}; \alpha_0, \beta_0, \ldots)$ jednaka ili bliska funkciji osnovnog stanja.

### 10.4.2 Računanje pobuđenih stanja i efikasnost varijacionog metoda

Prvo pobuđeno stanje može se odrediti varijacionim metodom ukoliko je poznata talasna funkcija osnovnog stanja $\psi_0$. Tada se energija i talasna funkcija $\psi$ prvog pobuđenog stanja dobijaju iz uslova

$$\delta E[\psi] = 0 \quad \wedge \quad \langle \psi_0 | \psi \rangle = 0, \tag{10.75}$$

tj. $E_1 = \min E[\psi]$ uz uslov $\langle \psi_0 | \psi \rangle = 0$. Ovo se dokazuje na sličan način kao teorema iz prethodnog odeljka. Ako je $\psi_0$ tačna ili približna funkcija osnovnog stanja, tj. $\varphi_0 \simeq \psi_0$, iz uslova $\langle \psi_0 | \psi \rangle = 0$ proizilazi da nulti koeficijent u razvoju talasne funkcije $\psi$ po svojstvenim stanjima hamiltonijana ima vrednost $c_0 = \langle \varphi_0 | \psi \rangle \simeq \langle \psi_0 | \psi \rangle = 0$. Prema tome, možemo pisati $\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n$, odakle sledi

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n \geq \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_1 = \langle \psi | \psi \rangle E_1, \tag{10.76}$$

odnosno $E[\psi] \geq E_1$. U ovom slučaju znak jednakosti važi ako i samo ako je $\psi$ prvo pobuđeno stanje.

Na analogan način, poznavajući talasne funkcije osnovnog i prvog pobuđenog stanja, može se odrediti drugo pobuđeno stanje i tako redom. Mogućnost određivanja svojstvenih stanja hamiltonijana varijacionim metodom ukazuje na to da je ovaj metod ekvivalentan rešavanju vremenski nezavisne Šredingerove jednačine. Ricova teorema (Walther Ritz), koju navodimo u nastavku, potvrđuje ovu pretpostavku.

**Teorema:** Svako stanje za koje srednja vrednost hamiltonijana posmatrana kao funkcional ima stacionarnu vrednost jeste svojstveno stanje diskretnog spektra tog hamiltonijana, a odgovarajuća svojstvena energija jednaka je toj stacionarnoj vrednosti.

**Dokaz:** Ako izraz za funkcional (10.71) napišemo u obliku $E[\psi]\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$, varijacija ove jednakosti daje

$$\delta E[\psi]\langle \psi | \psi \rangle + E[\psi]\langle \delta\psi | \psi \rangle + E[\psi]\langle \psi | \delta\psi \rangle = \langle \delta\psi | \hat{H} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{H} | \delta\psi \rangle, \tag{10.77}$$

odnosno

$$\delta E[\psi]\langle \psi | \psi \rangle = \langle \delta\psi | (\hat{H} - E[\psi]) | \psi \rangle + \langle \psi | (\hat{H} - E[\psi]) | \delta\psi \rangle. \tag{10.78}$$

Ako funkcional $E[\psi]$ u stanju $\psi$ ima stacionarnu vrednost, što je ekvivalentno uslovu $\delta E[\psi] = 0$, zahvaljujući konačnoj normi stanja ($\langle \psi | \psi \rangle < +\infty$), jednakost (10.78) svodi se na

$$\langle\delta\psi|(\hat{H} - E[\psi])|\psi\rangle + \langle\psi|(\hat{H} - E[\psi])|\delta\psi\rangle = 0. \tag{10.79}$$

Pošto ovaj rezultat važi za svaku varijaciju funkcije $\delta\psi$, on mora da važi i za varijaciju $i\delta\psi$. Zamenom $|\delta\psi\rangle \to i|\delta\psi\rangle$ (i ekvivalentno $\langle\delta\psi| \to -i\langle\delta\psi|$) sledi

$$-i\langle\delta\psi|(\hat{H} - E[\psi])|\psi\rangle + i\langle\psi|(\hat{H} - E[\psi])|\delta\psi\rangle = 0. \tag{10.80}$$

Deljenjem ove jednakosti sa $i$, a zatim oduzimanjem, odnosno sabiranjem poslednje dve jednakosti, dobija se

$$\langle\delta\psi|(\hat{H} - E[\psi])|\psi\rangle = 0, \quad \langle\psi|(\hat{H} - E[\psi])|\delta\psi\rangle = 0. \tag{10.81}$$

Konačno, zbog proizvoljnosti varijacije $\delta\psi$, imamo

$$(\hat{H} - E[\psi])|\psi\rangle = 0, \quad \langle\psi|(\hat{H} - E[\psi]) = 0. \tag{10.82}$$

Dobijene jednačine, koje su međusobno ekvivalentne zbog ermitskog karaktera hamiltonijana, imaju formu svojstvenog problema tog operatora, gde su svojstvene energije stacionarne vrednosti funkcionala $E[\psi]$, a odgovarajuća svojstvena stanja su stanja $\psi$ za koja je $\delta E[\psi] = 0$.

Efikasnost varijacionog metoda suštinski zavisi od izbora probne funkcije. Sa jedne strane ona mora biti dovoljno jednostavna da bi problem bio matematički rešiv, a sa druge dovoljno opšta da omogući variranje u dovoljno velikom domenu. Prilikom izbora probne funkcije takođe treba voditi računa da ona poseduje osobine koje se očekuju od egzaktne svojstvene funkcije hamiltonijana, kao što su simetrije, granični ili periodični uslovi, broj nula funkcije itd. Iako ovaj izbor u većini slučajeva nije jednoznačan, time se ne umanjuje efikasnost metoda, pošto se pokazalo da se dobre vrednosti za energiju mogu dobiti koristeći različite probne funkcije. Pri tome, koristeći fleksibilnije probne funkcije (npr. sa većim brojem parametara) dobijaju se rezultati koji su bliži egzaktnim. Slaba strana varijacionog metoda jeste već pomenuta činjenica da ne postoji pouzdan način da se utvrdi da li je dobijeni rezultat egzaktan ili aproksimativan, odnosno da se proceni veličina greške.

### 10.4.3 Primer: Određivanje energije i talasne funkcije osnovnog i prvog pobuđenog stanja linearnog harmonijskog oscilatora

Hamiltonijan linearnog harmonijskog oscilatora u koordinatnoj reprezentaciji ima oblik (4.125), dakle

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \tag{10.83}$$

gde je $m$ masa čestice koja vrši oscilovanje, a $\omega$ frekvencija oscilatora. Pošto je potencijal oscilatora parna funkcija, svojstvene funkcije hamiltonijana (10.83) imaju određenu parnost.

Koristeći varijacioni metod odredićemo prvo energiju i talasnu funkciju osnovnog stanja oscilatora. S obzirom na to da talasna funkcija osnovnog stanja ne treba da ima nule ($n = 0$), biramo parnu probnu funkciju, a da bi norma funkcije bila konačna, ona treba da teži nuli kada $x \to \pm\infty$. Probna funkcija koja ima oblik gausijana

$$\psi(x, \alpha) = Ae^{-\alpha x^2/2}, \tag{10.84}$$

gde je $\alpha$ realan parametar, ispunjava navedene zahteve. Normiranjem probne talasne funkcije na jedinicu

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\alpha, x)|^2 \mathrm{d}x = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} \mathrm{d}x = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = 1 \tag{10.85}$$

dobija se da je $A = (\alpha/\pi)^{1/4}$.

Srednja vrednost hamiltonijana (energije) oscilatora u stanju predstavljenom probnom funkcijom (10.84) glasi

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\alpha, x) \hat{H} \psi(\alpha, x) \mathrm{d}x \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} \psi(\alpha, x) \mathrm{d}x + \frac{1}{2} m\omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\alpha, x) x^2 \psi(\alpha, x) \mathrm{d}x \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (\alpha^2 x^2 - \alpha) e^{-\alpha x^2} \mathrm{d}x + \frac{1}{2} m\omega^2 |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} \mathrm{d}x. \end{aligned} \tag{10.86}$$

Zamenjujući u poslednji izraz vrednosti konstante $A$ i integrala $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} \mathrm{d}x = \sqrt{\pi/\alpha}$, $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} \mathrm{d}x = \sqrt{\pi/\alpha}/(2\alpha)$, dobijamo

$$E(\alpha) = \frac{1}{4} \left( \frac{\hbar^2 \alpha}{m} + \frac{m\omega^2}{\alpha} \right). \tag{10.87}$$

Uslov

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\alpha} = \frac{1}{4} \left( \frac{\hbar^2}{m} - \frac{m\omega^2}{\alpha^2} \right) = 0 \tag{10.88}$$

daje $\alpha_0^2 = m^2\omega^2/\hbar^2$, odnosno

$$\alpha_0 = \frac{m\omega}{\hbar}. \tag{10.89}$$

Prema tome, energija osnovnog stanja linearnog harmonijskog oscilatora dobijena varijacionim metodom sa probnom funkcijom (10.84) iznosi

$$E_0 = E(\alpha_0) = \frac{1}{2} \hbar\omega, \tag{10.90}$$

a odgovarajuća talasna funkcija glasi

$$\psi_0(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}, \tag{10.91}$$

što se poklapa sa egzaktnim rešenjem.

Odredićemo sada energiju i talasnu funkciju prvog pobuđenog stanja oscilatora. Pošto ova talasna funkcija treba da bude ortogonalna na funkciju osnovnog stanja i, takođe, da ima određenu parnost, u ovom slučaju uzimamo neparnu probnu funkciju. Zahtevajući, osim toga, da norma funkcije bude konačna, tj. da ona teži nuli kada $x \to \pm\infty$, probnu funkciju biramo u obliku

$$\psi(x,\beta) = Bx e^{-\beta x^2/2}, \tag{10.92}$$

gde je $\beta$ realan parametar. Normiranjem probne talasne funkcije na jedinicu

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\beta,x)|^2 \mathrm{d}x = |B|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\beta x^2} \mathrm{d}x = \frac{|B|^2}{2\beta}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}} = 1 \tag{10.93}$$

dobija se da je $B = \sqrt{2\beta}(\beta/\pi)^{1/4}$.

Srednja vrednost hamiltonijana (energije) oscilatora u stanju predstavljenom probnom funkcijom (10.92) glasi

$$\begin{aligned} E(\beta) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\beta,x)\hat{H}\psi(\beta,x)\mathrm{d}x \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\psi(\beta,x)\mathrm{d}x + \frac{1}{2}m\omega^2\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\beta,x)x^2\psi(\beta,x)\mathrm{d}x \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}|B|^2\int_{-\infty}^{+\infty} (\beta^2 x^4 - 3\beta x^2)e^{-\beta x^2}\mathrm{d}x + \frac{1}{2}m\omega^2|B|^2\int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-\beta x^2}\mathrm{d}x. \end{aligned} \tag{10.94}$$

Zamenjujući u poslednji izraz vrednosti konstante $B$ i integrala $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\beta x^2}\mathrm{d}x = \sqrt{\pi/\beta}/(2\beta)$, $\int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-\beta x^2}\mathrm{d}x = 3\sqrt{\pi/\beta}/(4\beta^2)$, dobijamo

$$E(\beta) = \frac{3}{4}\left(\frac{\hbar^2\beta}{m} + \frac{m\omega^2}{\beta}\right). \tag{10.95}$$

Uslov $\mathrm{d}E/\mathrm{d}\beta = 0$ očigledno daje isti rezultat kao i uslov (10.88), tj.

$$\beta_1 = \frac{m\omega}{\hbar}. \tag{10.96}$$

Prema tome, energija prvog pobuđenog stanja linearnog harmonijskog oscilatora dobijena varijacionim metodom sa probnom funkcijom (10.92) iznosi

$$E_1 = E(\beta_1) = \frac{3}{2}\hbar\omega, \tag{10.97}$$

a odgovarajuća talasna funkcija glasi

$$\psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\, x\, e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}, \tag{10.98}$$

što se takođe poklapa sa egzaktnim rešenjem.

# 10.5 Semiklasični metodi

Semiklasični metodi se oslanjaju na princip korespondencije između klasične i kvantne mehanike (v. odeljak 1.2.4) i daju utoliko tačnije rezultate što je tzv. (semi) klasični limit $\hbar \to 0$ bolje zadovoljen. Zbog prilaza koji se zasniva na računanju klasičnih trajektorija i primeni odgovarajućih kvantnih uslova na klasično dejstvo može se reći da metodološki oni imaju korene u staroj kvantnoj teoriji.

## 10.5.1 Sistemi sa jednim stepenom slobode. WKB aproksimacija

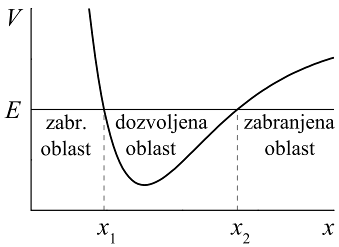
Razmotrimo prvo sistem sa jednim stepenom slobode. Pretpostavimo da se on sastoji od čestice mase $m$, čiji je položaj određen koordinatom $x$, i koja se kreće u potencijalu $V(x)$. Odgovarajuća vremenski nezavisna Šredingerova jednačina u koordinatnoj reprezentaciji glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{10.99}$$

Ovu jednačinu pogodno je napisati u obliku

$$\psi'' + \frac{[p(x)]^2}{\hbar^2}\,\psi(x) = 0, \tag{10.100}$$

gde je $\psi'' \equiv \mathrm{d}^2\psi/\mathrm{d}x^2$ i $p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$. Funkcija $p(x)$ određuje klasični impuls čestice energije $E$ u tački $x$ unutar klasično dozvoljene oblasti koja je određena uslovom $E > V(x)$ (slika 10.1). U kvantnoj mehanici, međutim, domen ove funkcije proširuje se i na klasično zabranjenu oblast, gde je $E < V(x)$, u kojoj impuls uzima imaginarne vrednosti. Uprkos tome, verovatnoća nalaženja čestice u toj oblasti može biti različita od nule, čime se, na primer, objašnjava tunel efekat (v. odeljak 4.3.5).




**Slika 10.1.** Dozvoljena oblast ($x_1 < x < x_2$) i zabranjene oblasti ($x < x_1$ i $x > x_2$) klasičnog kretanja čestice energije $E$ u potencijalu $V(x)$. Povratne tačke $x_1$ i $x_2$ određene su uslovima $V(x_1) = E$ i $V(x_2) = E$.

Da bismo odredili talasnu funkciju koja je rešenje jednačine (10.100), predstavićemo je u obliku

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma(x)}, \tag{10.101}$$

gde je $\sigma(x)$ neka kompleksna funkcija. Zamenjujući ovaj izraz u jednačinu (10.100), dobijamo

$$(\sigma')^2 = p^2 + i\hbar\sigma''. \tag{10.102}$$

Uzimajući da je $\hbar$ mala veličina, rešenje ove jednačine potražićemo u obliku razvoja u stepeni red po $-i\hbar$

$$\sigma = \sigma_0 - i\hbar\sigma_1 + (-i\hbar)^2\sigma_2 + \cdots. \tag{10.103}$$

Zamenjujući razvoj (10.103) u jednačinu (10.100) i izjednačavajući članove istog reda po $\hbar$, dobijamo

$$(\sigma_0{}')^2 = p^2, \tag{10.104}$$

$$2\sigma_0{}'\sigma_1{}' = -\sigma_0{}'', \tag{10.105}$$

$$2\sigma_0{}'\sigma_2{}' + (\sigma_1{}')^2 = -\sigma_1{}'', \tag{10.106}$$

$$\cdots .$$

Vodeći član $\sigma_0$ u razvoju (10.103) predstavlja funkciju $\sigma$ u klasičnom limitu $\hbar \to 0$. Odgovarajuću jednačinu (10.104) možemo napisati u obliku

$$\sigma_0{}' = \pm p, \tag{10.107}$$

što daje

$$\sigma_0(x) = \pm S(x) = \pm \int p(x)\mathrm{d}x. \tag{10.108}$$

U oblasti $E > V(x)$ integral $\int p(x)\mathrm{d}x$ je realan i predstavlja klasično dejstvo $S(x)$.

Član prvog reda $\sigma_1$ dobija se iz jednačine (10.105), koju ćemo napisati u obliku

$$\sigma_1{}' = -\frac{\sigma_0{}''}{2\sigma_0{}'} = -\frac{p'}{2p}. \tag{10.109}$$

Integracijom početnog i krajnjeg izraza sledi

$$\sigma_1 = -\frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}p}{p} = -\frac{1}{2}\ln p + \ln c, \tag{10.110}$$

gde je $c$ proizvoljna konstanta.

U WKB aproksimaciji razvoj (10.103) se ograničava na prva dva člana. Prema tome, rešenja Šredingerove jednačine (10.101) u toj aproksimaciji glase

$$\psi_{\mathrm{WKB}}(x) = e^{\pm\frac{i}{\hbar}S(x) - \frac{1}{2}\ln p + \ln c} = \frac{c}{\sqrt{p(x)}}\, e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int p(x)\mathrm{d}x}. \tag{10.111}$$

Faktor $1/\sqrt{p(x)}$, koji se pojavljuje u ovom izrazu, ima jednostavno tumačenje. Verovatnoća da se čestica u stanju opisanom tom funkcijom nađe unutar intervala $(x, x{+}\mathrm{d}x)$

jednaka je $|\psi_{\rm WKB}(x)|^2 {\rm d}x$ i, prema tome, proporcionalna $1/p$. Za klasičnu česticu ovo je očekivano, pošto je vreme koje bi ona provela u intervalu širine d$x$ obrnuto proporcionalno njenom impulsu (${\rm d}t = m{\rm d}x/p$).

Opšte rešenje Šredingerove jednačine u WKB aproksimaciji u oblasti $V(x) < E$ glasi

$$\begin{aligned}\psi_{\rm WKB}(x) &= \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar}\int p(x){\rm d}x} + \frac{c_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar}\int p(x){\rm d}x} \\ &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\frac{1}{\hbar}\int p(x){\rm d}x + \varphi\right],\end{aligned} \tag{10.112}$$

pri čemu je $c_{1,2} = \pm C\, e^{\pm i\varphi}/(2i)$.

S druge strane, opšte rešenje u oblasti $E < V(x)$ ima oblik

$$\psi_{\rm WKB}(x) = \frac{c_1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar}\int |p(x)|{\rm d}x} + \frac{c_2}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int |p(x)|{\rm d}x}. \tag{10.113}$$

Pošto je funkcija $p(x)$ u ovom slučaju čisto imaginarna, eksponenti $\pm(i/\hbar)\int p(x)\,{\rm d}x$ su realni, pa ih u ovom izrazu pišemo u obliku $\pm(1/\hbar)\int |p(x)|\,{\rm d}x$. Napomenimo da će rešenje (10.113) sadržati oba člana ukoliko je klasično zabranjena oblast konačan interval. Ova situacija se javlja u slučaju tuneliranja čestice kroz potencijalnu barijeru (v. odeljak 4.3.5). Ako, međutim, klasično zabranjena oblast sa jedne strane nije ograničena, talasna funkcija duboko u toj oblasti treba da teži nuli. Da bi se to postiglo, u rešenju (10.113) zadržavamo samo eksponencijalno opadajući član, dok eksponencijalno rastući isključujemo uzimajući da je odgovarajuća konstanta jednaka nuli (v. primere u odeljcima 4.3.1- 4.3.4).

Napomenimo da je rešenje jednačine (10.102) u obliku razvoja (10.103) validno pod uslovom da je član $i\hbar\sigma''$ po apsolutnoj vrednosti mnogo manji od apsolutne vrednosti člana $(\sigma')^2$, tj. ukoliko je $\hbar|\sigma''/(\sigma')^2| \ll 1$ ili

$$\left|\frac{{\rm d}(\hbar/\sigma')}{{\rm d}x}\right| \ll 1, \tag{10.114}$$

što se, s obzirom na to da je u klasičnom limitu $|\sigma'| = |p|$, može napisati u obliku

$$\left|\frac{{\rm d}\lambdabar}{{\rm d}x}\right| \ll 1, \tag{10.115}$$

gde je $\lambdabar(x) = \lambda(x)/2\pi$, a $\lambda(x) = h/p(x)$ De Broljeva talasna dužina u zavisnosti od $x$.

Najveće odstupanje WKB talasne funkcije u odnosu na tačnu funkciju javlja se u tzv. *klasičnim povratnim tačkama* $x_k$ ($k = 1, 2, \ldots$), gde je $E = V(x_k)$. Naime, u povratnoj tački je $p = 0$, zbog čega $\lambda(x)$ u njoj divergira, a funkcija $\psi_{\rm WKB}(x)$ ima singularitet (v. sliku 10.2). Međutim, pošto na dovoljno velikim rastojanjima od povratne tačke WKB aproksimacija ima zadovoljavajuću tačnost i u klasično dozvoljenoj i u klasično zabranjenoj oblasti, navedena poteškoća može se izbeći ako u okolini povratnih tačaka odredimo dovoljno tačno rešenje Šredingerove jednačine na drugi način i glatko ga spojimo sa WKB rešenjem.

### 10.5.2 Rešenje u okolini povratnih tačaka i formule povezivanja

Za široku klasu potencijala koji su u okolini povratnih tačaka približno linearni zadovoljavajuće rešenje dobija se razvijajući potencijal $V(x)$ u okolini tih tačaka u red i uzimajući prva dva člana razvoja. Na primer, u okolini povratne tačke $x_2$ za potencijal prikazan na slici 10.1 imamo

$$V(x) = E + V'(x_2)(x - x_2), \tag{10.116}$$

gde je $V'(x_2) \equiv (\mathrm{d}V/\mathrm{d}x)_{x=x_2} > 0$. U ovoj je aproksimaciji $p^2 = -2mV'(x_2)(x - x_2)$, pa Šredingerova jednačina (10.100) uzima oblik

$$\psi'' - \alpha^3(x - x_2)\psi(x) = 0, \tag{10.117}$$

gde je

$$\alpha = \left[\frac{2m}{\hbar^2}V'(x_2)\right]^{1/3}. \tag{10.118}$$

Uvodeći smenu $\xi = \alpha(x - x_2)$, ova jednačina se svodi na jednačinu

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} = \xi\psi(\xi), \tag{10.119}$$

čija su rešenja Ejrijeve (George Biddell Airy) funkcije $\mathrm{Ai}(\xi)$ i $\mathrm{Bi}(\xi)$, koje u integralnoj reprezentaciji imaju oblik

$$\mathrm{Ai}(\xi) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos\left(\frac{t^3}{3} + \xi t\right)\mathrm{d}t, \tag{10.120}$$

$$\mathrm{Bi}(\xi) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \left[\exp\left(-\frac{t^3}{3} + \xi t\right) + \sin\left(\frac{t^3}{3} + \xi t\right)\right]\mathrm{d}t. \tag{10.121}$$

Prema tome, opšte rešenje Šredingerove jednačine za potencijal koji je linearan ili je linearizovan u okolini povratne tačke $x_2$ (jednačina (10.119)) glasi

$$\psi_{\mathrm{lin}}(x) = a\,\mathrm{Ai}(\xi) + b\,\mathrm{Bi}(\xi), \tag{10.122}$$

gde su $a$ i $b$ proizvoljne konstante.

Asimptotske forme Ejrijevih funkcija za $\xi \gg 0$ glase

$$\mathrm{Ai}(\xi) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}\,\xi^{1/4}}\exp\left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right), \tag{10.123}$$

$$\mathrm{Bi}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\,\xi^{1/4}}\exp\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right), \tag{10.124}$$

dok za $\xi \ll 0$ imaju oblik

$$\mathrm{Ai}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\,(-\xi)^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right], \tag{10.125}$$

$$\mathrm{Bi}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\,(-\xi)^{1/4}} \cos\left[\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right]. \tag{10.126}$$

Rešenje u okolini povratne tačke iskoristićemo za spajanje WKB rešenja za talasnu funkciju u zabranjenoj i dozvoljenoj oblasti koje ta tačka razgraničava. Razmotrićemo prvo rešenja oko povratne tačke $x_2$.

*(i) Klasično zabranjena oblast: $x > x_2$.* WKB talasna funkcija u ovoj oblasti glasi

$$\psi_{\mathrm{WKB}}(x) = \frac{C'}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x} |p(x')|\,\mathrm{d}x'\right], \quad x > x_2. \tag{10.127}$$

Pošto u okolini $x_2$ važi $p(x) \approx i\hbar\alpha^{3/2}\sqrt{x - x_2}$, imamo $\int_{x_2}^{x} |p(x')|\,\mathrm{d}x' \approx \frac{2}{3}\hbar\alpha^{3/2}(x - x_2)^{3/2}$, pa je rešenje (10.127) u okolini iste tačke

$$\psi_{\mathrm{WKB}}(x) = \frac{C'}{\sqrt{\hbar}\alpha^{3/4}(x - x_2)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}\alpha^{3/2}(x - x_2)^{3/2}}. \tag{10.128}$$

Ovaj izraz važi ako je kvadratni član $V''(x_2)(x - x_2)^2/2$ u razvoju potencijala $V(x)$ mnogo manji od linearnog člana $V'(x_2)(x - x_2)$, tj. ako je

$$\varepsilon = \frac{V''(x_2)(x - x_2)^2}{2V'(x_2)(x - x_2)} = \frac{V''(x_2)(x - x_2)}{2V'(x_2)} \ll 1. \tag{10.129}$$

Ako je $V''(x_2) \ll V'(x_2)$, što važi za potencijal $V(x)$ koji je približno linearna funkcija u okolini povratne tačke $x_2$, moguće je izabrati tačku $x$ koja je dovoljno blizu tačke $x_2$ tako da važi gornja nejednakost, a ipak da je dovoljno udaljena od nje da se WKB aproksimacija može primeniti, te da je

$$\xi = \alpha(x - x_2) = \frac{2\alpha\varepsilon V'(x_2)}{V''(x_2)} \gg 1. \tag{10.130}$$

Tada se u tački $x$ mogu primeniti asimptotske forme Ejrijevih funkcija (10.123) i (10.124), pa se rešenje (10.122) može napisati u obliku

$$\psi_{\mathrm{lin}}(x) = \frac{a}{2\sqrt{\pi}\,\xi^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right) + \frac{b}{\sqrt{\pi}\,\xi^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right). \tag{10.131}$$

Poredeći ovaj izraz sa izrazom za WKB rešenje (10.128) u istoj tački, sledi

$$a = \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha\hbar}}\, C', \quad b = 0. \tag{10.132}$$

*(ii) Klasično dozvoljena oblast:* $x < x_2$. WKB talasna funkcija u ovoj oblasti glasi

$$\psi_{\mathrm{WKB}}(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p(x')\mathrm{d}x' + \varphi\right], \quad x < x_2. \tag{10.133}$$

Sada u okolini $x_2$ imamo $p(x) \approx \hbar\alpha^{3/2}\sqrt{x_2 - x}$ i $\int_x^{x_2} p(x')\,\mathrm{d}x' \approx \frac{2}{3}\hbar\alpha^{3/2}(x_2 - x)^{3/2}$, pa je rešenje (10.127) u okolini te tačke

$$\psi_{\mathrm{WKB}}(x) = \frac{C}{\sqrt{\hbar}\alpha^{3/4}(x_2 - x)^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}\alpha^{3/2}(x_2 - x)^{3/2} + \varphi\right]. \tag{10.134}$$

Ako je potencijal $V(x)$ približno linearna funkcija u okolini tačke $x_2$, moguće je izabrati tačku $x$ takvu da je WKB aproksimacija primenljiva i da je $\xi = \alpha(x - x_2) \ll -1$. Tada se u tački $x$ mogu primeniti asimptotske forme Ejrijevih funkcija (10.125) i (10.126), pa se rešenje (10.122) može napisati u obliku

$$\psi_{\mathrm{lin}}(x) = \frac{a}{\sqrt{\pi}\,(-\xi)^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] + \frac{b}{\sqrt{\pi}\,(-\xi)^{1/4}} \cos\left[\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right]. \tag{10.135}$$

Poredeći ovaj izraz sa izrazom za WKB rešenje (10.128) u istoj tački, sledi

$$a = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha\hbar}}\, C, \quad b = 0, \quad \varphi = \frac{\pi}{4}. \tag{10.136}$$

Relacije (10.132) i (10.136) su formule povezivanja, koje premošćuju WKB rešenja sa suprotnih strana povratne tačke. Na osnovu njih imamo da je $C' = C/2$, što nam omogućava da oba rešenja izrazimo preko iste normalizacione konstante

$$\psi_{\mathrm{WKB}}(x) = \begin{cases} \dfrac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_x^{x_2} p(x')\mathrm{d}x' + \dfrac{\pi}{4}\right], & x < x_2, \\[2ex] \dfrac{C}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{x_2}^{x} |p(x')|\,\mathrm{d}x'\right], & x > x_2. \end{cases} \tag{10.137}$$

Ponavljajući gornju proceduru za povratnu tačku $x_1$, dobijamo da je WKB talasna funkcija takođe parametrizovana jednom normalizacionom konstantom

$$\psi_{\mathrm{WKB}}(x) = \begin{cases} \dfrac{\tilde{C}}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{x_1}^{x} p(x')\mathrm{d}x' + \dfrac{\pi}{4}\right], & x > x_1, \\[2ex] \dfrac{\tilde{C}}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{x}^{x_1} |p(x')|\,\mathrm{d}x'\right], & x < x_1. \end{cases} \tag{10.138}$$

Formule povezivanja (10.132) i (10.136), koje se u suštini svode na relacije $C/C' = 2$, $\varphi = \pi/4$, važe za široku klasu potencijala koji su u okolini povratnih tačaka približno linearni i možemo ih smatrati standardnim vrednostima. Fazni član $\varphi = \pi/4$ u izrazima (10.137) i (10.138) može se interpretirati kao promena faze WKB talasa usled refleksije na odgovarajućoj povratnoj tački. Navedeni standardni izbor, međutim, nije adekvatan ukoliko se potencijal $V(x)$ ne može aproksimirati linearnom funkcijom oblika (10.116). Na primer, za česticu reflektovanu od beskonačno strmog zida faza refleksije je $\pi/2$ umesto $\pi/4$. Prema tome, određivanje tačne faze refleksije $\varphi$ predstavlja ključ za dobijanje WKB talasne funkcije koja je dobra aproksimacija rešenja Šredingerove jednačine u klasično dozvoljenoj oblasti[4]. Koristeći WKB aproksimaciju i formule povezivanja moguće je odrediti približna rešenja različitih problema koja se često poklapaju sa rešenjima dobijenim rešavanjem Šredingerove jednačine[5].

### 10.5.3 Pravilo kvantovanja za vezano kretanje

Sada ćemo izvesti kvantni uslov koji određuje energijske nivoe vezanog kretanja u semiklasičnom slučaju. Za potencijal sa dve povratne tačke $x_1$ i $x_2$, prikazan na slici 10.1, WKB talasna funkcija u oblasti $x_1 \leq x \leq x_2$ opisana je izrazima (10.137) i (10.138) među kojima, zbog jednoznačnosti talasne funkcije, možemo staviti znak jednakosti. Imamo, dakle, uslov

$$\frac{C}{\sqrt{p(x)}}\sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p(x')\mathrm{d}x' + \frac{\pi}{4}\right] = \frac{\tilde{C}}{\sqrt{p(x)}}\sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x')\mathrm{d}x' + \frac{\pi}{4}\right], \tag{10.139}$$

koji se može prepisati u obliku

$$\frac{C}{\sqrt{p(x)}}\sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p(x')\mathrm{d}x' + \frac{\pi}{4}\right] = -\frac{\tilde{C}}{\sqrt{p(x)}}\sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_1} p(x')\mathrm{d}x' - \frac{\pi}{4}\right]. \tag{10.140}$$

Poslednji uslov je zadovoljen ako je $\tilde{C} = (-1)^{n'}C$ i

$$\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p(x')\mathrm{d}x' + \frac{\pi}{4} = \frac{1}{\hbar}\int_x^{x_1} p(x')\mathrm{d}x' - \frac{\pi}{4} + n'\pi, \tag{10.141}$$

odnosno

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x')\mathrm{d}x' = \pi\hbar\left(n' - \frac{1}{2}\right), \tag{10.142}$$

gde je $n'$ ceo broj. Pošto u oblasti $x_1 \leq x \leq x_2$ uzimamo da je $p(x) \geq 0$ (čestica se kreće od tačke $x_1$ do tačke $x_2$), integral $\int_{x_1}^{x_2} p(x)\,\mathrm{d}x$ je pozitivan, pa se skup vrednosti od $n'$ ograničava na skup prirodnih brojeva. Fizičko tumačenje broja $n'$ je broj poluperioda WKB talasne funkcije u intervalu $(x_1, x_2)$. Uobičajeno je, međutim, da se uslov (10.142) izrazi preko broja nula talasne funkcije koji je $n = n' - 1$, dakle

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x)\mathrm{d}x = \pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots\,. \tag{10.143}$$

[4]Faza refleksije za različite tipove potencijala razmatrana je u knjizi „Teorijska atomska fizika" H. Fridriha (Harald Friedrich, *Theoretical Atomic Physics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2006).

[5]Ilustrativan primer je „tuneliranje" čestice kroz barijeru (v. odeljak 4.3.5). Ako je širina barijere dovoljno velika da je koeficijent transmisije $T \ll 1$, izraz za taj koeficijent u WKB aproksimaciji poklapa se sa izrazom (4.124) dobijenim rešavanjem Šredingerove jednačine. WKB rešenje ovog problema može se naći u knjizi „Kvantna mehanika" Davidova (bibl. ref. I.4).

Ako, umesto faznog integrala od $x_1$ do $x_2$, sada posmatramo integral duž puta između te dve tačke i nazad, tj. integral dejstva po celom periodu klasičnog kretanja $S = \oint p(x)\mathrm{d}x = 2\int_{x_1}^{x_2} p(x)\mathrm{d}x$, odgovarajući kvantni uslov glasi

$$S = \oint p(x)\mathrm{d}x = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots . \tag{10.144}$$

Ovaj uslov određuje stacionarna stanja čestice u semiklasičnom slučaju i on se poklapa sa Bor-Zomerfeldovim pravilom kvantovanja (Niels Bohr, Arnold Sommerfeld) iz stare kvantne teorije, gde je $n$ kvantni broj stacionarnog stanja (odeljci 1.2.2 i 1.2.3).

Vraćajući se na diskusiju o vrednosti faze refleksije $\varphi$, jasno je da pravilo kvantovanja (10.144) važi samo kada je potencijal dovoljno dobro aproksimiran linearnom funkcijom u blizini povratnih tačaka. U opštem slučaju faze refleksije $\varphi_1$ i $\varphi_2$ u povratnim tačkama $x_1$ i $x_2$ mogu biti različite od $\pi/4$, pa se ovo pravilo može napisati u opštijem obliku

$$S = \oint p(x)\mathrm{d}x = 2\pi\hbar\left(n + \frac{\mu}{4}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots , \tag{10.145}$$

gde je $\mu = (\varphi_1 + \varphi_2)/(\pi/4)$ tzv. *Maslovljev indeks* (Виктор Маслов). Štaviše, ovo pravilo važi za proizvoljan broj povratnih tačaka kada je

$$\mu = \frac{4}{\pi}\sum_k \varphi_k. \tag{10.146}$$

Ukoliko su sve faze $\varphi_k = \pi/4$, Maslovljev indeks $\mu$ predstavlja broj promena znaka impulsa $p(x)$ u toku jednog perioda klasičnog kretanja. Tako je za rotaciono kretanje $\mu = 0$, dok je za oscilovanje $\mu = 2$.

### 10.5.4 Primer: Određivanje stacionarnih stanja linearnog harmonijskog oscilatora pomoću WKB metoda

Potencijal linearnog harmonijskog oscilatora glasi $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$, pa iz uslova $V(x_{1,2}) = E$ sledi da su položaji povratnih tačaka $x_{1,2} = \pm a$, gde je $a = \sqrt{2E/m}/\omega$. Impuls kao funkcija koordinate tada se može napisati u obliku $p(x) = m\omega\sqrt{a^2 - x^2}$, pa integral dejstva po jednom periodu klasičnog kretanja iznosi

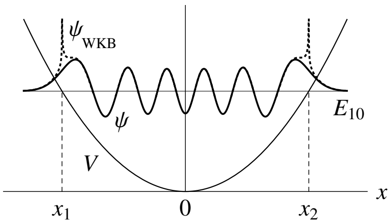
$$S = 2\int_{-a}^{a} p(x)\mathrm{d}x = 2\pi\frac{E}{\omega}. \tag{10.147}$$

Zamenjujući ovu vrednost u kvantni uslov (10.144), dobijamo semiklasični izraz za energije stacionarnih stanja oscilatora

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots , \tag{10.148}$$

koji se podudara sa egzaktnim kvantnomehaničkim rešenjem (7.50).

WKB talasna funkcija koja odgovara energijskom nivou linearnog harmonijskog oscilatora sa vrednošću kvantnog broja $n = 10$ određena je pomoću formula (10.137) i (10.138) i prikazana je na slici 10.2, zajedno sa tačnom talasnom funkcijom dobijenom rešavanjem Šredingerove jednačine.




**Slika 10.2.** Tačna talasna funkcija $\psi$ (puna linija) i WKB talasna funkcija $\psi_{\mathrm{WKB}}$ (tačkasta linija) stacionarnog stanja linearnog harmonijskog oscilatora sa vrednošću kvantnog broja $n = 10$.

### 10.5.5 Semiklasična kvantizacija sistema sa više stepeni slobode

WKB metod može se primeniti i na sisteme sa $N > 1$ stepeni slobode ukoliko su oni *separabilni*, tj. ukoliko se mogu razložiti na $N$ jednodimenzionih problema. U tom slučaju imamo $N$ kvantnih uslova

$$S_i = \oint p_i \mathrm{d}q_i = h\left(n_i + \frac{\mu_i}{4}\right), \quad i = 1, \ldots, N, \tag{10.149}$$

gde su $n_i = 0, 1, 2, \ldots$ kvantni brojevi, a $\mu_i$ odgovarajući Maslovljevi indeksi. Ovi kvantni uslovi daju dobre rezultate u opštem slučaju separabilnog sistema, a naročito za velike vrednosti kvantnih brojeva $n_i$.

Kvantni uslovi za višedimenzione separabilne sisteme dalje se uopštavaju na *integrabilne* sisteme. Integrabilan sistem sa $N$ stepeni slobode ima $N$ nezavisnih integrala kretanja koji su u involuciji, što znači da su Puasonove zagrade svih parova ovih veličina jednake nuli. Klasične trajektorije sistema tada leže na nekom $N$-dimenzionom (tzv. invarijantnom) torusu u $2N$-dimenzionom faznom prostoru, a dinamiku je pogodno opisati pomoću ugao-dejstvo varijabli $(\vartheta_i, I_i)$, $i = 1, \ldots, N$, koje su pridružene nezavisnim konturama $c_i$ torusa[6]. U opštem slučaju integrabilnog sistema (koji ne mora biti separabilan) može se primeniti Ajnštajn-Briluen-Kelerova (EBK) ili „torus” kvantizacija. EBK kvantni uslovi primenjuju se na komponente kretanja određene konturama $c_i$, tj. na odgovarajuće varijable dejstva

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \oint_{c_i} \mathbf{p} \cdot \mathrm{d}^N \mathbf{q} = \hbar\left(n_i + \frac{\mu_i}{4}\right), \quad i = 1, \ldots, N. \tag{10.150}$$

[6] Videti npr. knjigu „Mehanika” Landaua i Lifšica (bibl. ref. II.C.1).

Ovim uslovima se svakom integralu kretanja $I_i$ ($i$-toj varijabli dejstva) pridružuje dobar kvantni broj $n_i$, a ovako kvantovanom invarijantnom torusu pridružuje se stacionarno stanje određeno skupom dobrih kvantnih brojeva $n_i, i = 1, \dots, N$. Energije stacionarnih stanja određuju se iz Hamiltonove funkcije sistema izražene preko varijabli dejstva $E = H(I_1, \dots, I_N)$.

EBK kvantni uslovi ne mogu se primeniti na neintegrabilne sisteme, osim lokalno u oblastima faznog prostora gde je dinamika fizičkog sistema regularna (gde lokalno postoji $N$ integrala kretanja u involuciji). Matematički strogo zasnovana semiklasična teorija koja je primenljiva na neintegrabilne sisteme čija je dinamika potpuno iregularna (haotična) je Gucvilerova teorija periodičnih orbita (Martin C. Gutzwiller). Glavni rezultat teorije je tzv. formula traga, koja daje semiklasični spektar energija sistema preko sume doprinosa svih klasičnih periodičnih orbita tog sistema[7].

[7] Teorija periodičnih orbita opisana je u radovima i u knjigama mnogih autora. Pomenućemo knjigu „Haos u klasičnoj i kvantnoj mehanici" autora teorije (M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer 1991).

# 11 Opšta teorija ugaonog momenta

## 11.1 Teorija jednog ugaonog momenta

### 11.1.1 Definicija i komutacione relacije

U poglavlju 3.3, posvećenom operatorima fizičkih veličina, kvantizacijom ugaonog momenta (momenta impulsa) čestice uveden je operator orbitnog ugaonog momenta $\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ (izraz (3.104)). U pitanju je vektorski operator čije komponente $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$ (date izrazima (3.105)-(3.107)) zadovoljavaju komutacione relacije $[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} \hat{l}_k$ (relacije (5.19)), gde je $\varepsilon_{ijk}$ simbol Levi-Ćivita (Tullio Levi-Civita, v. izraz (5.20)) i $\hat{l}_1 \equiv \hat{l}_x$, $\hat{l}_2 \equiv \hat{l}_y$, $\hat{l}_3 \equiv \hat{l}_z$. Važna posledica ovih komutacionih relacija jeste komutiranje operatora kvadrata orbitnog ugaonog momenta sa svojim komponentama, tj. $[\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_i] = 0$ (relacija (5.21)).

U kvantnoj fizici pokazano je da realna čestica (kao što je elektron), pored orbitnog ugaonog momenta, poseduje i ugaoni moment koji odgovara njenim unutrašnjim stepenima slobode, tzv. spin. Pri tome, orbitni i spinski moment mogu da se vektorski sabiraju dajući ukupni ugaoni moment čestice. Konačno, u višečestičnim sistemima momenti pojedinačnih čestica takođe se sabiraju dajući orbitne, spinske ili ukupne momente pojedinih delova ili celog sistema. Sve ovo predstavlja razlog da se u kvantnoj mehanici formuliše opšta teorija ugaonog momenta, iz koje se pomenuti ugaoni momenti dobijaju kao specijalni slučajevi.

Pokazuje se da se sve opšte osobine orbitnog ugaonog momenta u kvantnoj mehanici mogu izvesti polazeći od komutacionih relacija među operatorima njegovih komponenata. Na osnovu te činjenice, po analogiji sa orbitnim ugaonim momentom, definišemo *operator ugaonog momenta* u opštem slučaju kao *vektorski* operator $\hat{\mathbf{j}} = (\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z)$ čije su komponente *opservable* koje zadovoljavaju komutacione relacije

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ijk} \hat{j}_k, \quad i, j = 1, 2, 3, \tag{11.1}$$

pri čemu indeksi $1, 2, 3$ redom odgovaraju komponentama $\hat{j}_x$, $\hat{j}_y$, $\hat{j}_z$.

Iz relacija (11.1) sledi da operator kvadrata ugaonog momenta $\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2$, kao i operator kvadrata orbitnog ugaonog momenta, komutira sa operatorima svojih komponenata, dakle

$$[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3. \tag{11.2}$$

Dokaz je analogan dokazu (5.22). Imamo

$$
\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_i] &= \left[\sum_j \hat{j}_j^2, \hat{j}_i\right] = -\sum_j [\hat{j}_i, \hat{j}_j^2] = -\sum_j (\hat{j}_j[\hat{j}_i, \hat{j}_j] + [\hat{j}_i, \hat{j}_j]\hat{j}_j) \\
&= -i\hbar \sum_j \left(\hat{j}_j \sum_k \varepsilon_{ijk}\hat{j}_k + \sum_k \varepsilon_{ijk}\hat{j}_k\hat{j}_j\right) = -i\hbar \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk}\hat{j}_j\hat{j}_k - i\hbar \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk}\hat{j}_k\hat{j}_j \qquad (11.3) \\
&= -i\hbar \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk}\hat{j}_j\hat{j}_k + i\hbar \sum_{j,k} \varepsilon_{ikj}\hat{j}_j\hat{j}_k = -i\hbar \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk}\hat{j}_j\hat{j}_k + i\hbar \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk}\hat{j}_j\hat{j}_k = 0.
\end{aligned}
$$

Prema tome, $\hat{\mathbf{j}}^2$ komutira sa sve tri komponente operatora $\hat{\mathbf{j}}$, ali one ne komutiraju međusobno. Odavde sledi da je moguće istovremeno tačno poznavati (izmeriti) vrednosti kvadrata ugaonog momenta i jedne od komponenata. Po konvenciji se uzima z-komponenta. U nastavku ćemo proučiti zajednički svojstveni problem $\hat{\mathbf{j}}^2$ i $\hat{j}_z$.

### 11.1.2 Svojstveni problem operatora $\hat{\mathbf{j}}^2$ i $\hat{j}_z$

Zajednički svojstveni problem operatora $\hat{\mathbf{j}}^2$ i $\hat{j}_z$ možemo pisati u obliku

$$\hat{\mathbf{j}}^2|jm\rangle = \hbar^2\lambda|jm\rangle, \qquad (11.4)$$

$$\hat{j}_z|jm\rangle = \hbar m|jm\rangle, \qquad (11.5)$$

gde su $|jm\rangle$ zajednički svojstveni vektori, a $\hbar^2\lambda$ i $\hbar m$ svojstvene vrednosti operatora $\hat{\mathbf{j}}^2$ odnosno $\hat{j}_z$. Po analogiji sa orbitnim momentom pisaćemo $\lambda = j(j+1)$, a vrednosti bezdimenzionih veličina $\lambda$ (odnosno $j$) i $m$ ćemo odrediti u nastavku. Vektori $|jm\rangle$ su međusobno ortogonalni i pretpostavljamo da su normirani na jedinicu, tj.

$$\langle jm|j'm'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}. \qquad (11.6)$$

Skup svih vektora $|jm\rangle$ čini zajednički svojstveni bazis operatora $\hat{\mathbf{j}}^2$ i $\hat{j}_z$ koji ćemo zvati *standardni bazis*.

### 11.1.3 Operatori podizanja i spuštanja

U cilju rešavanja zajedničkog svojstvenog problema operatora $\hat{\mathbf{j}}^2$ i $\hat{j}_z$ uvešćemo dva pomoćna operatora, *operator podizanja* $\hat{j}_+$ i *operator spuštanja* $\hat{j}_-$, kao sledeće kombinacije x i y komponente operatora $\hat{\mathbf{j}}$

$$\hat{j}_\pm = \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y. \qquad (11.7)$$

Pošto je $(\hat{j}_\pm)^+ = \hat{j}_\mp$, jasno je da ovi operatori nisu ermitski. Koristeći njihovu definiciju (11.7) i relacije (11.1) i (11.2), lako se pokazuje da važe komutacione relacije

$$[\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hbar\hat{j}_z, \quad [\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = \pm\hbar\hat{j}_\pm, \quad [\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_\pm] = 0. \qquad (11.8)$$

Ako se operatori x i y komponente ugaonog momenta izraze preko operatora podizanja i spuštanja, tj. $\hat{j}_x = (\hat{j}_+ + \hat{j}_-)/2$, $\hat{j}_y = (\hat{j}_+ - \hat{j}_-)/2i$, operator kvadrata ugaonog momenta može se napisati u obliku

$$\hat{\mathbf{j}}^2 = \frac{1}{2}(\hat{j}_+\hat{j}_- + \hat{j}_-\hat{j}_+) + \hat{j}_z^2. \tag{11.9}$$

Koristeći, zatim, prvu od relacija (11.8), dalje možemo pisati $\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{j}_+\hat{j}_- + \hat{j}_z^2 - \hbar\hat{j}_z$ ili $\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{j}_-\hat{j}_+ + \hat{j}_z^2 + \hbar\hat{j}_z$, odakle sledi

$$\hat{j}_+\hat{j}_- = \hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 + \hbar\hat{j}_z, \quad \hat{j}_-\hat{j}_+ = \hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 - \hbar\hat{j}_z. \tag{11.10}$$

Prema tome, $\hat{j}_\pm\hat{j}_\mp \neq \hat{I}$, što znači da operatori $\hat{j}_\pm$ nisu ni unitarni.

### 11.1.4 Delovanje operatora podizanja i spuštanja na vektore standardnog bazisa

Iz komutacione relacije $[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_+] = 0$ (treća od relacija (11.8)) sledi $\hat{\mathbf{j}}^2\hat{j}_+ = \hat{j}_+\hat{\mathbf{j}}^2$, na osnovu čega je $\hat{\mathbf{j}}^2\hat{j}_+|jm\rangle = \hat{j}_+\hat{\mathbf{j}}^2|jm\rangle = \hbar^2\lambda\,\hat{j}_+|jm\rangle$, dakle

$$\hat{\mathbf{j}}^2(\hat{j}_+|jm\rangle) = \hbar^2\lambda(\hat{j}_+|jm\rangle). \tag{11.11}$$

Analogno iz relacije $[\hat{j}_z, \hat{j}_+] = \hbar\hat{j}_+$ (druga od relacija (11.8)) sledi $j_z\hat{j}_+ = \hat{j}_+\hat{j}_z + \hbar\hat{j}_+$, odakle je $\hat{j}_z\hat{j}_+|jm\rangle = \hat{j}_+\hat{j}_z|jm\rangle + \hbar\hat{j}_+|jm\rangle = \hbar(m+1)\hat{j}_+|jm\rangle$, odnosno

$$\hat{j}_z(\hat{j}_+|jm\rangle) = \hbar(m+1)(\hat{j}_+|jm\rangle). \tag{11.12}$$

Jednakosti (11.11) i (11.12) imaju oblik zajedničkog svojstvenog problema operatora $\hat{\mathbf{j}}^2$ i $\hat{j}_z$ sa svojstvenim vrednostima $\hbar^2\lambda$ i $\hbar(m+1)$ i sa zajedničkim svojstvenim vektorom $\hat{j}_+|jm\rangle$. Ove svojstvene vrednosti ukazuju da taj vektor mora biti proporcionalan vektoru $|j, m+1\rangle$, tj.

$$\hat{j}_+|jm\rangle = c_+|j, m+1\rangle. \tag{11.13}$$

Koeficijent proporcionalnosti $c_+$ dobija se računajući kvadrat modula obe strane ovog izraza. Zbog normiranosti vektora $|j, m\rangle$ i $|j, m+1\rangle$, sledi

$$\begin{aligned} |c_+|^2 &= |j_+|jm\rangle|^2 = \langle jm|\hat{j}_-\hat{j}_+|jm\rangle = \langle jm|\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 - \hbar\hat{j}_z|jm\rangle \\ &= \hbar^2(j^2 + j - m^2 - m), \end{aligned} \tag{11.14}$$

odnosno

$$|c_+|^2 = \hbar^2(j-m)(j+m+1). \tag{11.15}$$

Koristeći komutacione relacije sa operatorom $\hat{j}_-$ analogno se dobija

$$\hat{\mathbf{j}}^2(\hat{j}_-|jm\rangle) = \hbar^2\lambda(\hat{j}_-|jm\rangle), \tag{11.16}$$

$$\hat{j}_z(\hat{j}_-|jm\rangle) = \hbar(m-1)(\hat{j}_-|jm\rangle), \tag{11.17}$$

što daje

$$\hat{j}_-|jm\rangle = c_-|j, m-1\rangle, \tag{11.18}$$

pri čemu je

$$|c_-|^2 = \hbar^2(j+m)(j-m+1). \tag{11.19}$$

Konačno, delovanje operatora podizanja i spuštanja na svojstvene vektore $|jm\rangle$ može se napisati u opštem obliku

$$\hat{j}_\pm|jm\rangle = \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,|j, m\pm 1\rangle. \tag{11.20}$$

### 11.1.5 Svojstvene vrednosti operatora $\hat{\mathbf{j}}^2$ i $\hat{j}_z$

Da bismo odredili svojstvene vrednosti $\hbar^2\lambda$ i $\hbar m$ prvo ćemo pokazati da je $\lambda \geq 0$. Pošto je $\hbar^2\lambda$ svojstvena vrednost operatora $\hat{\mathbf{j}}^2$ koja odgovara svojstvenom vektoru $|jm\rangle$, imamo

$$\begin{aligned} \hbar^2\lambda &= \langle jm|\hat{\mathbf{j}}^2|jm\rangle = \langle jm|\sum_i \hat{j}_i^2|jm\rangle = \sum_i \langle jm|\hat{j}_i^2|jm\rangle = \sum_i \langle jm|\hat{j}_i\hat{j}_i|jm\rangle \\ &= \sum_i (\langle jm|\hat{j}_i^+)(\hat{j}_i|jm\rangle) = \sum_i \left|\hat{j}_i|jm\rangle\right|^2 \geq 0. \end{aligned} \tag{11.21}$$

U sledećem koraku iskoristićemo delovanje operatora podizanja i spuštanja na vektore $|jm\rangle$. Iz uslova pozitivnosti kvadrata modula $|c_+|^2 \geq 0$ i $|c_-|^2 \geq 0$ slede nejednakosti

$$(j-m)(j+m+1) \geq 0 \quad \wedge \quad (j+m)(j-m+1) \geq 0 \tag{11.22}$$

iz kojih se dobija $(-j-1 \leq m \leq j) \wedge (-j \leq m \leq j+1)$, što konačno daje

$$-j \leq m \leq j. \tag{11.23}$$

Ovaj uslov, poznat kao pravilo trougla, znači da apsolutna vrednost z-projekcije ugaonog momenta ($\hbar m$) ne može biti manja od intenziteta tog momenta ($\hbar\sqrt{\lambda}$).

Može se postaviti pitanje šta bi se dobilo ako bi se operatorima podizanja i spuštanja delovalo na svojstvena stanja $|jm\rangle$ sa maksimalnom, odnosno minimalnom vrednošću $m$. Da bismo dobili odgovor, uočimo da je $c_+ = 0$ za $m = j$ i $c_- = 0$ za $m = -j$. Prema tome

$$\hat{j}_+|jj\rangle = 0 \quad \text{i} \quad \hat{j}_-|j, -j\rangle = 0. \tag{11.24}$$

Nulti vektori koji se dobijaju kao rezultat, s obzirom na to da im je norma jednaka nuli, ne predstavljaju kvantna stanja (verovatnoća nalaženja sistema u takvom „stanju" bila bi jednaka nuli). Prema tome, vrednost $m = j$ nije moguće dalje povećavati, niti vrednost $m = -j$ smanjivati (u skladu sa pravilom trougla).

Uočimo da se stanje $|jj\rangle$ može dobiti iz stanja $|jm\rangle$ uzastopnim delovanjem operatora $\hat{j}_+$ $p$ puta, a stanje $|j,-j\rangle$ uzastopnim delovanjem operatora $\hat{j}_-$ $q$ puta, tj.

$$(\hat{j}_+)^p|jm\rangle \sim |jj\rangle \quad \text{i} \quad (\hat{j}_-)^q|jm\rangle \sim |j,-j\rangle, \tag{11.25}$$

ako su $p = j - m$ i $q = j + m$. Očigledno je $p + q = 2j$, odnosno $j = (p + q)/2$. Pošto su $p$ i $q$ pozitivni celi brojevi (ili nula) sledi da $j$ mora biti *ceo* ili *poluceo* broj, tj. može da uzima vrednosti

$$j = 0,\ \tfrac{1}{2},\ 1,\ \tfrac{3}{2},\ 2,\ \ldots\ . \tag{11.26}$$

Pošto je $p$ (i $q$) ceo broj, onda iz $m = j-p$ (ili $m = q-j$) sledi da je $m$ *iste* celobrojnosti kao $j$, tj. ako je $j$ ceo odnosno poluceo broj, onda isto važi i za veličinu $m$.

Iz (polu)celobrojnosti veličina $j$ i $m$ proizilazi da su svojstvene vrednosti $\hbar m$ i $\hbar^2\lambda = \hbar^2 j(j+1)$ diskretne. Veličine $j$ i $m$ koje prebrojavaju ove svojstvene vrednosti nazivamo *kvantni broj ugaonog momenta*, odnosno *kvantni broj z-projekcije ugaonog momenta*. Kako je razmak dve susedne celobrojne ili dve susedne polucelobrojne vrednosti jednak jedinici, sledi da se vrednost kvantnog broja $m$ uvek menja u koracima po jedan, tj.

$$m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j. \tag{11.27}$$

Vidimo da za datu vrednost kvantnog broja $j$ postoji $2j + 1$ vrednosti kvantnog broja $m$ i taj skup nazivamo *multiplet*.

### 11.1.6 Konstrukcija svojstvenih vektora $|jm\rangle$

Da bismo konstruisali vektore multipleta $|jm\rangle$, $m = -j, \ldots, j$, na početku je dovoljno poznavati samo jedan od njih, npr. $|jj\rangle$ ili $|j,-j\rangle$. Ako pođemo od vektora $|jj\rangle$, koji je zadat (do na fazu i normu) prvom od jednakosti (11.24), ostale vektore dobijamo uzastopnom primenom operatora spuštanja. Sledi

$$\hat{j}_-|jj\rangle = \hbar\sqrt{2j\cdot 1}\,|j, j-1\rangle, \tag{11.28}$$

$$\hat{j}_-^2|jj\rangle = \hbar^2\sqrt{2j\cdot 1}\,\sqrt{(2j-1)\cdot 2}\,|j, j-2\rangle, \tag{11.29}$$

$$\cdots$$

$$\begin{aligned} \hat{j}_-^p|jj\rangle &= \hbar^p\sqrt{2j\cdot 1}\,\sqrt{(2j-1)\cdot 2}\cdots\sqrt{(2j-p+1)\cdot p}\,|j, j-p\rangle \\ &= \hbar^p\sqrt{\frac{(2j)!\,p!}{(2j-p)!}}\,|j, j-p\rangle. \end{aligned} \tag{11.30}$$

Ako stavimo $j - p = m$, poslednja jednakost postaje

$$\hat{j}_-^{j-m}|jj\rangle = \hbar^{j-m}\sqrt{\frac{(2j)!\,(j-m)!}{(j+m)!}}\,|jm\rangle, \tag{11.31}$$

odakle se dobija

$$|jm\rangle = \frac{1}{\hbar^{j-m}}\sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!\,(j-m)!}}\;\hat{j}_-^{\,j-m}|jj\rangle. \tag{11.32}$$

Višestrukim delovanjem operatora $\hat{j}_+$ na vektor $|j,-j\rangle$, koji je zadat drugom od jednakosti (11.24), na analogan način dobijamo

$$|jm\rangle = \frac{1}{\hbar^{j+m}}\sqrt{\frac{(j-m)!}{(2j)!\,(j+m)!}}\;\hat{j}_+^{\,j+m}|j,-j\rangle. \tag{11.33}$$

## 11.1.7 Svojstvena stanja orbitnog ugaonog momenta

Orbitni ugaoni moment ili orbitni moment impulsa čestice (npr. elektrona) predstavlja realističan primer ugaonog momenta gde kvantni broj $j$, koji ovde označavamo sa $l$ i zovemo kvantni broj kvadrata orbitnog ugaonog momenta ili orbitni kvantni broj, uzima samo celobrojne vrednosti

$$l = 0, 1, 2, \dots\,. \tag{11.34}$$

Kvantni broj projekcije orbitnog momenta za datu vrednost $l$ može da ima $2l+1$ različitih vrednosti koje čine odgovarajući multiplet

$$m_l = -l, \dots, l. \tag{11.35}$$

Zajednički svojstveni problem operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$ u Dirakovoj notaciji pišemo

$$\hat{\mathbf{l}}^2\,|l, m_l\rangle = \hbar^2 l(l+1)\,|l, m_l\rangle, \tag{11.36}$$

$$\hat{l}_z\,|l, m_l\rangle = \hbar m_l\,|l, m_l\rangle. \tag{11.37}$$

U poglavlju 5.2, gde je predstavljena teorija orbitnog ugaonog momenta, zajednički svojstveni problem ova dva operatora (jednačine (5.65) i (5.66)) bio je rešavan u prostoru $\mathcal{L}^2$. U tom prilazu zajedničke svojstvene funkcije operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$, koje odgovaraju svojstvenim vrednostima $\hbar^2 l(l+1)$ i $\hbar m_l$, bili su sferni harmonici $Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi)$. Sferni harmonici, prema tome, predstavljaju koordinatnu reprezentaciju vektora $|l, m_l\rangle$. Naime, predstavljajući vektor položaja čestice u sfernim koordinatama $\mathbf{r} = (r, \vartheta, \varphi)$, orbitni prostor stanja čestice može se napisati kao direktni proizvod $\mathcal{H}_o = \mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_\vartheta \otimes \mathcal{H}_\varphi$, gde kompozitni potprostori odgovaraju radijalnom ($r$) i ugaonim ($\vartheta$, $\varphi$) stepena slobode čestice. Kompletan skup kompatibilnih opservabli, koji je adekvatan takvoj dekompoziciji prostora $\mathcal{H}_o$, čine opservable $\hat{r}$, $\hat{\vartheta}$, $\hat{\varphi}$. Ako su $|r\rangle$, $|\vartheta\rangle$, $|\varphi\rangle$ svojstveni vektori tih opservabli, onda se svojstveni vektori operatora $\hat{\mathbf{r}}$ mogu predstaviti u obliku $|\mathbf{r}\rangle = |r\rangle|\vartheta\rangle|\varphi\rangle$. Skup vektora $|\vartheta, \varphi\rangle \equiv |\vartheta\rangle|\varphi\rangle$, $\vartheta \in [0, \pi]$, $\varphi \in [0, 2\pi)$ tada čini svojstveni bazis opservabli $\hat{\vartheta}$, $\hat{\varphi}$ u ugaonom potprostoru $\mathcal{H}_\vartheta \otimes \mathcal{H}_\varphi$ i sferni harmonici mogu se napisati u obliku

$$Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi) = \langle \vartheta, \varphi | l, m_l\rangle. \tag{11.38}$$

## 11.2 Naelektrisana čestica u elektromagnetnom polju

Za rigorozan opis interakcije naelektrisane čestice (ili više njih) sa elektromagnetnim poljem kvantna mehanika nije dovoljna teorija, već je potreban jedan širi okvir koji uključuje kvantnu elektrodinamiku, gde se i elektromagnetno polje tretira preko njegovih kvanata – fotona. Međutim, čak i u relativno slabim poljima gustina fotona može biti veoma velika i pod tim okolnostima njihov broj može se tretirati kao neprekidna promenljiva, te se polje može opisati na klasičan način koristeći Maksvelove jednačine. Ovakav semiklasični prilaz u kome se polje tretira klasično, a mehanički sistem koji interaguje sa tim poljem kvantno, predstavlja dobru aproksimaciju pod navedenim okolnostima i stoga se često primenjuje. Uz to se obično podrazumeva da se uticaj posmatranog mehaničkog sistema na polje može zanemariti. Formalan način da se pređe na ovakav opis jeste kvantizacija odgovarajuće Hamiltonove funkcije koja sadrži članove u kojima se električno i magnetno polje pojavljuju kroz skalarni i vektorski potencijal. Ovi potencijali, s obzirom na to da zavise od koordinata, kvantizacijom će, uz ostale fizičke veličine, preći u opservable.

### 11.2.1 Hamiltonijan za naelektrisanu česticu u elektromagnetnom polju

U klasičnoj elektrodinamici elektromagnetno polje izražava se preko skalarnog i vektorskog potencijala $\phi$ i $\mathbf{A}$ kao

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla\phi, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \tag{11.39}$$

Hamiltonova funkcija naelektrisane čestice u elektromagnetnom polju tada ima oblik

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi, \tag{11.40}$$

gde je $q$ naelektrisanje čestice, a $m$ njena masa.

Nakon kvantovanja potencijali $\phi$ i $\mathbf{A}$ postaju multiplikativni operatori (u koordinatnoj reprezentaciji), a odgovarajući hamiltonijan glasi

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}})^2 + q\hat{\phi} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{q}{2m}(\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}}\cdot\hat{\mathbf{p}}) + \frac{q^2}{2m}\hat{\mathbf{A}}^2 + q\hat{\phi}. \tag{11.41}$$

Napomenimo da se u poslednjem izrazu pojavljuje simetrizovani proizvod operatora $\hat{\mathbf{p}}$ i $\hat{\mathbf{A}}$ pošto ovi operatori ne komutiraju (v. odeljak 6.3.6). Koristeći relaciju $\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}\cdot\hat{\mathbf{p}} - i\hbar\,\mathrm{div}\hat{\mathbf{A}}$, koja se u koordinatnoj reprezentaciji dokazuje delovanjem na talasnu funkciju: $\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{A}}\psi = -i\hbar\nabla\cdot(\hat{\mathbf{A}}\psi) = -i\hbar(\nabla\cdot\hat{\mathbf{A}})\psi - i\hbar\hat{\mathbf{A}}\cdot\nabla\psi = (-i\hbar\,\mathrm{div}\hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}}\cdot\hat{\mathbf{p}})\psi$, sledi

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{q}{2m}(2\hat{\mathbf{A}}\cdot\hat{\mathbf{p}} - i\hbar\,\mathrm{div}\hat{\mathbf{A}}) + \frac{q^2}{2m}\hat{\mathbf{A}}^2 + q\hat{\phi}. \tag{11.42}$$

Konačno, koristeći *Kulonov kalibracioni uslov* $\mathrm{div}\mathbf{A} = 0$, imamo

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{q}{m}\hat{\mathbf{A}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \frac{q^2}{2m}\hat{\mathbf{A}}^2 + q\hat{\phi}. \tag{11.43}$$

### 11.2.2 Atom sa jednim elektronom u konstantnom homogenom magnetnom polju. Zemanov efekat

Posmatrajmo sada atom sa jednim elektronom koji se nalazi u konstantnom i homogenom spoljašnjem magnetnom polju. U tom slučaju skalarni potencijal elektromagnetnog polja u kojem se elektron kreće svodi se na Kulonov potencijal jezgra atoma

$$\phi = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze}{r}, \tag{11.44}$$

gde je $Ze$ nalektrisanje jezgra, dok se vektorski potencijal može napisati u obliku

$$\mathbf{A} = \tfrac{1}{2}\mathbf{B}\times\mathbf{r}. \tag{11.45}$$

Poslednji izraz se potvrđuje računajući vrednosti za $\mathrm{rot}\,\mathbf{A}$ i $\mathrm{div}\,\mathbf{A}$. Koristeći relaciju $\nabla\times(\mathbf{a}\times\mathbf{b}) = \mathbf{a}(\nabla\cdot\mathbf{b}) - \mathbf{b}(\nabla\cdot\mathbf{a}) + (\mathbf{b}\cdot\nabla)\mathbf{a} - (\mathbf{a}\cdot\nabla)\mathbf{b}$, dobija se

$$\begin{aligned}\mathrm{rot}\mathbf{A} &= \nabla\times\mathbf{A} = \tfrac{1}{2}\nabla\times(\mathbf{B}\times\mathbf{r})\\ &= \tfrac{1}{2}[\mathbf{B}\underbrace{(\nabla\cdot\mathbf{r})}_{3} - \mathbf{r}\underbrace{(\nabla\cdot\mathbf{B})}_{0} + \underbrace{(\mathbf{r}\cdot\nabla)\mathbf{B}}_{\mathbf{0}} - \underbrace{(\mathbf{B}\cdot\nabla)\mathbf{r}}_{\mathbf{B}}] = \mathbf{B},\end{aligned} \tag{11.46}$$

što predstavlja desnu od relacija (11.39). Napomenimo da u izvođenju imamo $(\mathbf{r}\cdot\nabla)\mathbf{B} = \sum_{i=1}^{3} x_i(\partial/\partial x_i)\mathbf{B} = 0$ upravo zbog toga što je polje homogeno, tj. ne zavisi od koordinata. S druge strane, koristeći relaciju $\nabla\cdot(\mathbf{a}\times\mathbf{b}) = \mathbf{b}\cdot(\nabla\times\mathbf{a}) - \mathbf{a}\cdot(\nabla\times\mathbf{b})$, sledi

$$\mathrm{div}\mathbf{A} = \tfrac{1}{2}\nabla\cdot(\mathbf{B}\times\mathbf{r}) = \tfrac{1}{2}\mathbf{r}\cdot\underbrace{(\nabla\times\mathbf{B})}_{\mathbf{0}} - \tfrac{1}{2}\mathbf{B}\cdot\underbrace{(\nabla\times\mathbf{r})}_{\mathbf{0}} = 0, \tag{11.47}$$

što se slaže sa izabranim (Kulonovim) kalibracionim uslovom. Napomenimo ovde da vrednost $\nabla\times\mathbf{B} = \mathbf{0}$ sledi iz četvrte Maksvelove jednačine $\nabla\times\mathbf{B} = (\partial\mathbf{E}/\partial t)/c^2$ na osnovu pretpostavke da je polje (magnetno, a time i električno) konstantno, tj. ne zavisi od vremena.

Koristeći navedeni izraz za vektorski potencijal u slučaju konstantnog i homogenog magnetnog polja, sledi

$$\hat{\mathbf{A}}\cdot\hat{\mathbf{p}} = \tfrac{1}{2}(\mathbf{B}\times\hat{\mathbf{r}})\cdot\hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}})\cdot\mathbf{B} = \tfrac{1}{2}\mathbf{B}\cdot(\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}}) = \tfrac{1}{2}\mathbf{B}\cdot\hat{\mathbf{l}}, \tag{11.48}$$

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{A}}^2 &= \tfrac{1}{2}(\mathbf{B}\times\hat{\mathbf{r}})\cdot\hat{\mathbf{A}} = \tfrac{1}{2}\mathbf{B}\cdot(\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{A}}) = \tfrac{1}{4}\mathbf{B}\cdot[\hat{\mathbf{r}}\times(\mathbf{B}\times\hat{\mathbf{r}})]\\ &= \tfrac{1}{4}\mathbf{B}\cdot[\mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{r}}) - \hat{\mathbf{r}}(\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{B})] = \tfrac{1}{2}[B^2r^2 - (\mathbf{B}\cdot\hat{\mathbf{r}})^2].\end{aligned} \tag{11.49}$$

Uobičajeno je da se pravac magnetnog polja izabere za z-osu, tj. $\mathbf{B} = B\,\mathbf{e}_z$. Tada je

$$\hat{\mathbf{A}}\cdot\hat{\mathbf{p}} = \tfrac{1}{2}\mathbf{B}\cdot\hat{\mathbf{l}} = \tfrac{1}{2}B\hat{l}_z \tag{11.50}$$

i

$$\hat{\mathbf{A}}^2 = \tfrac{1}{4}(B^2r^2 - B^2z^2) = \tfrac{1}{4}B^2(x^2+y^2). \tag{11.51}$$

Na osnovu dobijenih izraza i izraza (11.43), uzimajući da je za elektron $q = -e$ i $m = m_\mathrm{e}$, hamiltonijan koji opisuje njegovu dinamiku u jednoelektronskom atomu koji se nalazi u konstantnom i homogenom spoljašnjem magnetnom polju glasi (u aproksimaciji beskonačne mase jezgra atoma)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{eB}{2m_\mathrm{e}}\hat{l}_z + \frac{e^2B^2}{8m_\mathrm{e}}(x^2+y^2), \tag{11.52}$$

gde je $\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m_\mathrm{e}) - Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$ hamiltonijan slobodnog atoma.

U atomu u osnovnom stanju i u nižim pobuđenim stanjima atoma važi $l_z \sim \hbar$ i $(x^2+y^2)^{1/2} \sim a_0$ (Borov radijus), tako da je za slabija polja poslednji (dijamagnetni) član mnogo manji od prethodnog (paramagnetnog). U tom slučaju poslednji član se može zanemariti, čime se hamiltonijan svodi na oblik

$$\hat{H} \approx \hat{H}_0 + \frac{eB}{2m_\mathrm{e}}\hat{l}_z = \hat{H}_0 + \omega_\mathrm{L}\hat{l}_z, \tag{11.53}$$

gde je $\omega_\mathrm{L} = eB/(2m_\mathrm{e})$ *Larmorova frekvencija* (Joseph Larmor). Kao što je poznato, operatori $\hat{H}_0$ i $\hat{l}_z$ komutiraju i imaju zajedničke svojstvene funkcije $\psi_{nlm_l}(\mathbf{r})$. Na osnovu toga je

$$\hat{H}\psi_{nlm_l} = \hat{H}_0\psi_{nlm_l} + \omega_\mathrm{L}\hat{l}_z\psi_{nlm_l} = (E_n^{(0)} + \omega_\mathrm{L}\hbar m_l)\psi_{nlm_l}, \tag{11.54}$$

što znači da su $\psi_{nlm_l}(\mathbf{r})$ svojstvene funkcije ne samo hamiltonijana $\hat{H}_0$, već i hamiltonijana $\hat{H}$, pri čemu su odgovarajuće svojstvene energije

$$E_{nm_l} = E_n^{(0)} + \hbar\omega_\mathrm{L} m_l. \tag{11.55}$$

Poslednji izraz znači da, kada se jednoelektronski atom nađe u spoljašnjem magnetnom polju, dolazi do cepanja njegovih nivoa na podnivoe koji su okarakterisani kvantnim brojem projekcije orbitnog ugaonog momenta $m_l$, koji se iz tog razloga naziva i *magnetni kvantni broj*. Ako se ovo cepanje posmatra na atomima koji se nalaze u stanju sa određenim vrednostima kvantnih brojeva $n$ i $l$, nivo $E_n^{(0)}$ (energija van polja) će se cepati na $2l+1$ ekvidistantnih podnivoa ($\Delta E = \hbar\omega_\mathrm{L}$) koji odgovaraju vrednostima $m_l = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$. Ova pojava se naziva *Zemanov efekat* (Pieter Zeeman).

Član $\hbar\omega_\mathrm{L} m_l = \omega_\mathrm{L} l_z$ u izrazu (11.55) predstavlja energiju interakcije elektrona sa magnetnim poljem koja se može napisati u obliku

$$E_\mathrm{int} = -\boldsymbol{\mu}_l \cdot \mathbf{B}, \tag{11.56}$$

gde je

$$\boldsymbol{\mu}_l = -\mu_\mathrm{B}\mathbf{l}/\hbar \tag{11.57}$$

*magnetni moment elektrona*, koji je ovde izražen preko veličine

$$\mu_\mathrm{B} = \frac{e\hbar}{2m_\mathrm{e}} \tag{11.58}$$

poznate kao *Borov magneton*. Količnik apsolutnih vrednosti magnetnog i orbitnog momenta elektrona, $|\boldsymbol{\mu}_l|/|\mathbf{l}| = \mu_\mathrm{B}/\hbar = e/2m_\mathrm{e}$, naziva se *žiromagnetni odnos*.

### 11.2.3 Atom u nehomogenom magnetnom polju. Štern-Gerlahov eksperiment

Ako se snop atoma koji poseduju nenulti magnetni moment propusti kroz nehomogeno magnetno polje, zbog sile koja je proporcionalna gradijentu polja u pravcu normalnom na pravac prostiranja snopa, dolazi do prostornog cepanja snopa u pravcu polova magneta na onoliko delova koliko ima mogućih vrednosti kvantnog broja $m_l$. Štern i Gerlah (Otto Stern, Walther Gerlach) izveli su eksperiment (1921-1922) u kojem su merili cepanje snopa atoma srebra u takvom polju. U uslovima eksperimenta većina atoma nalazila se u osnovnom stanju. Atom srebra ima jedan spoljašnji elektron, čiji su kvantni brojevi u osnovnom stanju $n = 5$ i $l = 0$, i taj elektron određuje ugaoni moment atoma. Pošto magnetni kvantni broj u ovom slučaju može biti jedino $m_l = 0$, cepanje snopa nije bilo očekivano. Eksperiment je, međutim, pokazao da se snop cepa na dva dela[1]. Ovaj rezultat mogao je da se protumači jedino tako da kvantni broj ugaonog momenta atoma ima vrednost $1/2$, a da kvantni broj njegove projekcije onda ima dve vrednosti, $\pm 1/2$.

## 11.3 Spin

Rezultat Štern-Gerlahovog eksperimenta nije mogao da se objasni dotadašnjom teorijom koja je magnetni moment elektrona dovodila u vezu isključivo sa njegovim orbitnim momentom, pa su Gaudsmit i Ulembek (Samuel Goudsmit, George Uhlenbeck) 1925. godine izneli pretpostavku da elektron ima dodatni ugaoni moment kao posledicu sopstvene rotacije, koji je kasnije nazvan *spin*. Pošto projekcija na proizvoljno izabrani pravac može imati samo dve vrednosti, $-\hbar/2$ i $\hbar/2$, sledi da spin elektrona ima vrednost $\hbar/2$. Ubrzo se pokazalo da predstava o rotirajućem elektronu nije prihvatljiva jer se procenilo da bi periferna brzina rotacije morala da bude mnogo veća od brzine svetlosti. Danas se smatra da je spin ugaoni moment koji odgovara *unutrašnjim* stepenima slobode čestice.

Pokazuje se da postoje čestice sa *celobrojnim* i čestice sa *polucelobrojnim* kvantnim brojem spina $s$. Prve se nazivaju *bozoni* pošto se pokoravaju tzv. Boze-Ajnštajnovoj statistici, a druge *fermioni* jer se pokoravaju tzv. Fermi-Dirakovoj statistici. Ova dva tipa kvantne statistike opisuju način na koji sistem neinteragujućih identičnih čestica sa spinom date celobrojnosti, kada se nalazi u termodinamičkoj ravnoteži, popunjava skup mogućih stanja. U glavi 12 videćemo da je celobrojnost spina povezana i sa simetrijom ukupnog stanja čestice (VIII postulat). Primeri bozona su mezoni ($\pi$ i K-mezon), kod kojih je $s=0$, i fotoni, kod kojih je $s=1$, dok su primeri fermiona leptoni (elektron, $\mu$-mezon, neutrina) i barioni (proton, neutron itd.), kod kojih je $s = 1/2$.

[1] Uzimajući u obzir da se jedan manji broj atoma snopa može naći u nižim pobuđenim stanjima sa $l > 0$, moglo se eventualno očekivati cepanje snopa na neparan broj $(2l+1)$ delova koji bi, sem onog za $m_l = 0$, bili veoma slabog intenziteta. Međutim, eksperiment je pokazao da se ni to ne dešava. Fips i Tejlor (T. E. Phipps, J. B. Tailor) 1927. godine reprodukovali su rezultat Štern-Gerlahovog eksperimenta koristeći snop atoma vodonika u osnovnom stanju, čime su eliminisali sve sumnje koje su mogle biti izazvane primenom atoma srebra.

### 11.3.1 Formalna teorija spina 1/2

Primenjujući opštu teoriju ugaonog momenta na spin sa $s = 1/2$, odgovarajući zajednički svojstveni problem glasi

$$\hat{\mathbf{s}}^2|s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s, m_s\rangle, \tag{11.59}$$

$$\hat{s}_z|s, m_s\rangle = \hbar m_s|s, m_s\rangle, \tag{11.60}$$

pri čemu kvantni broj projekcije spina na z-osu može imati vrednosti $m_s = \pm 1/2$. Prema tome, postoje dva svojstvena spinska stanja, $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ i $|\frac{1}{2}, \text{-}\frac{1}{2}\rangle$, koja odgovaraju različitim svojstvenim vrednostima projekcije spina, $s_z = \hbar/2$, odnosno $-\hbar/2$, i istoj (jedino mogućoj) svojstvenoj vrednosti kvadrata spina $\mathbf{s}^2 = 3\hbar^2/4$. Ova dva spinska stanja predstavljaju bazis u spinskom prostoru stanja $\mathcal{H}_s$ čestice spina 1/2 koji je dvodimenzion.

Odgovarajući operatori podizanja i spuštanja $\hat{s}_\pm = \hat{s}_x \pm i\hat{s}_y$ deluju na svojstvena spinska stanja kao

$$\hat{s}_\pm|\tfrac{1}{2}, m_s\rangle = \hbar\sqrt{(1/2 \mp m_s)(1/2 \pm m_s + 1)}\,|\tfrac{1}{2}, m_s \pm 1\rangle, \tag{11.61}$$

odnosno

$$\begin{aligned} &\hat{s}_+|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle = 0, \quad \hat{s}_+|\tfrac{1}{2}, \text{-}\tfrac{1}{2}\rangle = \hbar|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle, \\ &\hat{s}_-|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle = \hbar|\tfrac{1}{2}, \text{-}\tfrac{1}{2}\rangle, \quad \hat{s}_-|\tfrac{1}{2}, \text{-}\tfrac{1}{2}\rangle = 0. \end{aligned} \tag{11.62}$$

Množeći skalarno ove izraze, kao i izraz $\hat{s}_z|\frac{1}{2}, m_s\rangle = \hbar m_s|\frac{1}{2}, m_s\rangle$, sa leve strane vektorima ta dva ista stanja, dobijamo matrične elemente operatora $\hat{s}_\pm$ i $\hat{s}_z$, odnosno njihove matrične reprezentacije u bazisu $\{|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, \text{-}\frac{1}{2}\rangle\}$

$$\hat{s}_+ = \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hbar & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix}. \tag{11.63}$$

Koristeći relacije $\hat{s}_x = (\hat{s}_+ + \hat{s}_-)/2$ i $\hat{s}_y = (\hat{s}_+ - \hat{s}_-)/2i$, dobijaju se matrične reprezentacije za komponente vektorskog operatora spina $\hat{\mathbf{s}}$

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{11.64}$$

Uvodeći Paulijeve matrice (Wolfgang Pauli)

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{11.65}$$

možemo pisati

$$\hat{s}_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i, \quad i = x, y, z. \tag{11.66}$$

Navešćemo nekoliko osobina Paulijevih matrica. Pokazuje se da važi

$$\begin{gathered}\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \operatorname{tr}\sigma_i = 0, \quad \det\sigma_i = -1, \\ [\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \quad [\sigma_x, \sigma_y]_+ = 0 \quad (\sigma_x \text{ i } \sigma_y \text{ antikomutiraju}),\end{gathered} \tag{11.67}$$

odakle sledi $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z$, odnosno $\sigma_x\sigma_y\sigma_z = iI$. Ako trokomponentni vektori **A** i **B** komutiraju sa $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, važi

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}\, I + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}). \tag{11.68}$$

Svojstvena stanja spina $1/2$ u bazisu koji čine ta ista stanja reprezentuju se dvokomponentnim matricama kolonama

$$|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle \to \chi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\tfrac{1}{2}, \text{-}\tfrac{1}{2}\rangle \to \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{11.69}$$

Proizvoljno spinsko stanje je neka linearna kombinacija dva svojstvena stanja

$$|\chi\rangle = c_1|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle + c_2|\tfrac{1}{2}, \text{-}\tfrac{1}{2}\rangle \to c_1\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \tag{11.70}$$

Uslov normiranja $\langle\chi|\chi\rangle = 1$ daje $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$.

### 11.3.2 Spinori. Spinski magnetni moment

Uzimajući u obzir i orbitne i spinske stepene slobode, stanje čestice je opisano vektorom iz Hilbertovog prostora koji predstavlja direktni proizvod njenog orbitnog i spinskog prostora stanja $\mathcal{H} = \mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_s$. U opštem slučaju taj vektor je linearna kombinacija direktnih (tenzorskih) proizvoda vektora $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_o$ i $|\chi\rangle \in \mathcal{H}_s$. U slučaju elektrona (ili neke druge čestice spina $1/2$) proizvoljno stanje može se napisati u obliku

$$c_1|\psi_1\rangle|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle + c_2|\psi_2\rangle|\tfrac{1}{2}, \text{-}\tfrac{1}{2}\rangle. \tag{11.71}$$

Ako su orbitna stanja predstavljena talasnim funkcijama, a spinska stanja dvokomponentnim matricama kolonama, onda je to stanje reprezentovano dvokomponentnom talasnom funkcijom, tzv. *spinorom*

$$\psi_1(\mathbf{r})\begin{pmatrix} c_1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2(\mathbf{r})\begin{pmatrix} 0 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \tag{11.72}$$

gde su $\psi_+ = c_1\psi_1$ i $\psi_- = c_2\psi_2$. Spinor je, prema tome, koordinatno-matrična reprezentacija vektora iz punog prostora stanja elektrona $\mathcal{H}$.

Primer spinora su svojstvena stanja atoma vodonika

$$\psi_{nlm_lm_s} = \psi_{nlm_l}(\mathbf{r})\chi_{m_s}. \tag{11.73}$$

Analogno magnetnom momentu $\boldsymbol{\mu}_l$, koji je proporcionalan orbitnom ugaonom momentu, elektron poseduje i spinski magnetni moment predstavljen operatorom

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = -g_s \frac{e}{2m_\mathrm{e}} \hat{\mathbf{s}}. \tag{11.74}$$

Ovde je $g_s \approx 2$ tzv. Landeov (Alfred Landé) faktor za spin (eksperimentalna vrednost je $g_s = 2{,}002$)[2].

Operator ukupnog magnetnog momenta elektrona je vektorski zbir magnetnog momenta elektrona, koji potiče od njegovog orbitnog kretanja, i spinskog magnetnog momenta elektrona, dakle

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \hat{\boldsymbol{\mu}}_l + \hat{\boldsymbol{\mu}}_s = -\frac{e}{2m_\mathrm{e}}(\hat{\mathbf{l}} + g_s\hat{\mathbf{s}}) \approx -\frac{e}{2m_\mathrm{e}}(\hat{\mathbf{l}} + 2\hat{\mathbf{s}}) = -\frac{e}{2m_\mathrm{e}}(\hat{\mathbf{l}} + \hbar\boldsymbol{\sigma}). \tag{11.75}$$

Uzimajući u obzir ukupni moment, hamiltonijan elektrona u potencijalu $V(\mathbf{r})$ (npr. u polju jezgra atoma) i u magnetnom polju indukcije $\mathbf{B}$ ima oblik (u koordinatnoj reprezentaciji)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}\Delta + V(\mathbf{r}) - \hat{\boldsymbol{\mu}}\cdot\mathbf{B}. \tag{11.76}$$

Reprezentujući stanja elektrona spinorima, Šredingerova jednačina ima oblik

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_+(\mathbf{r},t)\\ \psi_-(\mathbf{r},t)\end{pmatrix} = \hat{H}\begin{pmatrix}\psi_+(\mathbf{r},t)\\ \psi_-(\mathbf{r},t)\end{pmatrix}. \tag{11.77}$$

U slučaju hamiltonijana (11.76) ova jednačina opisuje promenu stanja elekrona (sa spinom) u datom potencijalu $V(\mathbf{r})$ i spoljašnjem konstantnom i homogenom magnetnom polju. Njen eksplicitni oblik je

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_+(\mathbf{r},t)\\ \psi_-(\mathbf{r},t)\end{pmatrix} = \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}\Delta + V(\mathbf{r}) + \frac{\mu_\mathrm{B}}{\hbar}\,\hat{\mathbf{l}}\cdot\mathbf{B}\right)\hat{I}_s + \mu_\mathrm{B}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}\right]\begin{pmatrix}\psi_+(\mathbf{r},t)\\ \psi_-(\mathbf{r},t)\end{pmatrix}. \tag{11.78}$$

Jednačina predstavlja specijalni slučaj *Paulijeve jednačine*, koja u opštem slučaju opisuje promenu stanja čestice spina 1/2 u elektromagnetnom polju.

[2]U okviru Dirakove relativističke teorije elektrona vrednost Landeovog faktora za spin $g_s = 2$ dobija se kao rezultat teorije.

## 11.4 Slaganje ugaonih momenata

Neka su $\hat{\mathbf{j}}_1$ i $\hat{\mathbf{j}}_2$ operatori ugaonih momenata $\mathbf{j}_1$ i $\mathbf{j}_2$ dva (pod)sistema ili dva različita stepena slobode složenog kvantnog sistema. Primer su orbitni momenti dva elektrona u atomu ($\hat{\mathbf{j}}_1 = \hat{\mathbf{l}}_1$, $\hat{\mathbf{j}}_2 = \hat{\mathbf{l}}_2$) ili orbitni i spinski moment jednog elektrona ($\hat{\mathbf{j}}_1 = \hat{\mathbf{l}}$, $\hat{\mathbf{j}}_2 = \hat{\mathbf{s}}$). Operatori $\hat{\mathbf{j}}_1$ i $\hat{\mathbf{j}}_2$, prema tome, deluju u različitim potprostorima prostora stanja sistema koje ćemo obeležiti sa $\mathcal{H}_1$ i $\mathcal{H}_2$. Operator $\hat{\mathbf{j}}$ koji pridružujemo zbiru momenata $\mathbf{j} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2$ tada deluje u direktnom proizvodu prostora $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ i ima oblik

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{j}}_1 \otimes \hat{I}_2 + \hat{I}_1 \otimes \hat{\mathbf{j}}_2, \tag{11.79}$$

gde su $\hat{I}_1$ i $\hat{I}_2$ jedinični operatori u prostorima $\mathcal{H}_1$ i $\mathcal{H}_2$. Očigledno, pre sabiranja operatori $\hat{\mathbf{j}}_1$ i $\hat{\mathbf{j}}_2$ morali su biti modifikovani tako da oba deluju u $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, što je postignuto množenjem sa odgovarajućim jediničnim operatorima. U nastavku ćemo, međutim, radi jednostavnosti pisati $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2$, podrazumevajući da su $\hat{\mathbf{j}}_1$ i $\hat{\mathbf{j}}_2$ ovako modifikovani operatori.

Operator $\hat{\mathbf{j}}$ ima sve osobine operatora ugaonog momenta, tj.

(i) $\hat{\mathbf{j}}$ je vektorski operator, dakle $\hat{\mathbf{j}} = \sum_{i=1}^{3} \hat{j}_i \mathbf{e}_i$;

(ii) komponente $\hat{j}_i$ su ermitski operatori;

(iii) komponente $\hat{j}_i$ zadovoljavaju komutacione relacije

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} \hat{j}_k, \tag{11.80}$$

pri čemu vrednosti 1, 2, 3, koje uzimaju indeksi, odgovaraju komponentama x, y, z. Osobine (i) i (ii) direktno slede iz istih osobina za operatore pojedinačnih momenata $\hat{\mathbf{j}}_1, \hat{\mathbf{j}}_2$. Osobina (iii) dokazuje se polazeći od komutacionih relacija za komponente pojedinačnih ugaonih momenata (11.1), te činjenice da operatori koji deluju u različitim Hilbertovim prostorima uvek komutiraju – u ovom slučaju $[\hat{j}_{1i}, \hat{j}_{2j}] = 0$, $\forall i, j$. Dakle

$$\begin{aligned}
[\hat{j}_i, \hat{j}_j] &= [\hat{j}_{1i} + \hat{j}_{2i}, \hat{j}_{1j} + \hat{j}_{2j}] = [\hat{j}_{1i}, \hat{j}_{1j}] + \underbrace{[\hat{j}_{2i}, \hat{j}_{1j}]}_{0} + \underbrace{[\hat{j}_{1i}, \hat{j}_{2j}]}_{0} + [\hat{j}_{2i}, \hat{j}_{2j}] \\
&= i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} \hat{j}_{1k} + i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} \hat{j}_{2k} = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} \hat{j}_k.
\end{aligned} \tag{11.81}$$

### 11.4.1 Komutacione relacije. Zajednički svojstveni vektori

Kao i za svaki ugaoni moment, operator kvadrata ukupnog ugaonog momenta komutira sa operatorima svojih komponenata, tj.

$$[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_i] = 0, \tag{11.82}$$

dok te komponente međusobno ne komutiraju. Kao posledica toga, postoje zajednička svojstvena stanja operatora $\hat{\mathbf{j}}^2$ i jedne od komponenata. Po konvenciji se uzima komponenta $\hat{j}_z$.

Postavlja se pitanje da li operatori kvadrata i komponenata pojedinačnih momenata komutiraju sa operatorima $\hat{\mathbf{j}}^2$ i $\hat{j}_z$. Odgovor dajemo kroz dokaze sledećih teorema.

**Teorema:** Operatori $\hat{\mathbf{j}}_1^2$ i $\hat{\mathbf{j}}_2^2$ komutiraju sa operatorima $\hat{\mathbf{j}}^2$ i $\hat{j}_z$.

**Dokaz:** Koristeći komutacione relacije (11.80) i (11.82), te činjenice da operatori koji deluju u različitim Hilbertovim prostorima komutiraju, sledi

$$\begin{aligned}[\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{\mathbf{j}}^2] &= [\hat{\mathbf{j}}_1^2, (\hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2)^2] = \underbrace{[\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{\mathbf{j}}_1^2]}_{0} + 2\,[\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{\mathbf{j}}_1 \cdot \hat{\mathbf{j}}_2] + \underbrace{[\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{\mathbf{j}}_2^2]}_{0} = 2\,[\hat{\mathbf{j}}_1^2, \sum_i \hat{j}_{1i}\,\hat{j}_{2i}] \\ &= 2\sum_i [\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{j}_{1i}\,\hat{j}_{2i}] = 2\sum_i \hat{j}_{1i}\,\underbrace{[\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{j}_{2i}]}_{0} + 2\sum_i \underbrace{[\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{j}_{1i}]}_{0}\,\hat{j}_{2i} = 0\end{aligned} \tag{11.83}$$

i

$$[\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{j}_i] = [\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{j}_{1i} + \hat{j}_{2i}] = \underbrace{[\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{j}_{1i}]}_{0} + \underbrace{[\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{j}_{2i}]}_{0} = 0. \tag{11.84}$$

Na analogan način izračunavaju se komutatori $[\hat{\mathbf{j}}_2^2, \hat{\mathbf{j}}^2] = 0$ i $[\hat{\mathbf{j}}_2^2, \hat{j}_i] = 0$.

**Teorema:** Operatori $\hat{j}_{1z}$ i $\hat{j}_{2z}$ komutiraju sa operatorom $\hat{j}_z$, ali ne komutiraju sa $\hat{\mathbf{j}}^2$.

**Dokaz:** Koristeći iste komutacione relacije kao u prethodnoj teoremi, sledi

$$[\hat{j}_{1z}, \hat{j}_z] = [\hat{j}_{1z}, \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}] = \underbrace{[\hat{j}_{1z}, \hat{j}_{1z}]}_{0} + \underbrace{[\hat{j}_{1z}, \hat{j}_{2z}]}_{0} = 0 \tag{11.85}$$

i

$$\begin{aligned}[\hat{j}_{1z}, \hat{\mathbf{j}}^2] &= [\hat{j}_{1z}, (\hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2)^2] = \underbrace{[\hat{j}_{1z}, \hat{\mathbf{j}}_1^2]}_{0} + 2\,[\hat{j}_{1z}, \hat{\mathbf{j}}_1 \cdot \hat{\mathbf{j}}_2] + \underbrace{[\hat{j}_{1z}, \hat{\mathbf{j}}_2^2]}_{0} = 2\,[\hat{j}_{1z}, \sum_i \hat{j}_{1i}\hat{j}_{2i}] \\ &= 2\sum_i [\hat{j}_{1z}, \hat{j}_{1i}\,\hat{j}_{2i}] = 2\sum_i \hat{j}_{1i}\,\underbrace{[\hat{j}_{1z}, \hat{j}_{2i}]}_{0} + 2\sum_i [\hat{j}_{1z}, \hat{j}_{1i}]\,\hat{j}_{2i} \\ &= 2\,[\hat{j}_{1z}, \hat{j}_{1x}]\,\hat{j}_{2x} + 2\,[\hat{j}_{1z}, \hat{j}_{1y}]\,\hat{j}_{2y} + 2\,\underbrace{[\hat{j}_{1z}, \hat{j}_{1z}]}_{0}\,\hat{j}_{2z} \\ &= 2i\hbar\hat{j}_{1y}\hat{j}_{2x} + 2i\hbar\hat{j}_{1x}\hat{j}_{2y} \neq 0.\end{aligned} \tag{11.86}$$

Na analogan način izračunavaju se komutatori $[\hat{j}_{2z}, \hat{j}_i] = 0$ i $[\hat{j}_{2z}, \hat{\mathbf{j}}^2] \neq 0$.

Na osnovu činjenice da operatori $\hat{\mathbf{j}}_1^2$, $\hat{\mathbf{j}}_2^2$, $\hat{\mathbf{j}}^2$ i $\hat{j}_z$ međusobno komutiraju sledi da oni imaju zajedničke svojstvene vektore. Oni, štaviše, čine jedan kompletan skup kompatibilnih opservabli u prostoru $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, tako da su zajednički svojstveni vektori potpuno određeni sa četiri kvantna broja $j_1$, $j_2$, $j$, $m$, koja prebrojavaju njihove svojstvene vrednosti. Dakle

$$\hat{\mathbf{j}}^2\,|j_1, j_2; j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j_1, j_2; j, m\rangle, \tag{11.87}$$

$$\hat{j}_z\,|j_1, j_2; j, m\rangle = \hbar m|j_1, j_2; j, m\rangle, \tag{11.88}$$

$$\hat{\mathbf{j}}_1^2\,|j_1, j_2; j, m\rangle = \hbar^2 j_1(j_1+1)|j_1, j_2; j, m\rangle, \tag{11.89}$$

$$\hat{\mathbf{j}}_2^2\,|j_1, j_2; j, m\rangle = \hbar^2 j_2(j_2+1)|j_1, j_2; j, m\rangle. \tag{11.90}$$

Skup svih vektora $|j_1, j_2; j, m\rangle$, prema tome, čini svojstveni bazis ova četiri operatora u prostoru $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Uočimo, međutim, da vektori $|j_1, j_2; j, m\rangle$ nisu svojstveni za operatore $\hat{j}_{1z}$ i $\hat{j}_{2z}$, tako da komponente $j_{1z}$ i $j_{2z}$ u stanjima koja ti vektori opisuju nemaju određene vrednosti (drugim rečima, $m_1$ i $m_2$ ovde nisu dobri kvantni brojevi). Ovaj bazis je, prema tome, pogodan za opis stanja ukupnog ugaonog momenta $\mathbf{j}$, ali nije pogodan za pojedinačne momente.

Za opis stanja pojedinačnih momenata $\mathbf{j}_1$, $\mathbf{j}_2$, koji formiraju ukupni moment $\mathbf{j}$, pogodno je uvesti drugi bazis u $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Njega čine proizvodi vektora $|j_1, m_1\rangle$ i $|j_2, m_2\rangle$, koji su svojstveni vektori operatora $\hat{\mathbf{j}}_1^2$, $\hat{j}_{1z}$, odnosno $\hat{\mathbf{j}}_2^2$, $\hat{j}_{2z}$. Pri tome, skupovi svih vektora $|j_1, m_1\rangle$ i $|j_2, m_2\rangle$ odvojeno čine bazise u prostorima $\mathcal{H}_1$ i $\mathcal{H}_2$. Vektore bazisa u ukupnom prostoru obeležavaćemo sa $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$. Oni su zajednički svojstveni vektori druga četiri operatora, $\hat{\mathbf{j}}_1^2$, $\hat{j}_{1z}$, $\hat{\mathbf{j}}_2^2$, $\hat{j}_{2z}$, koji takođe predstavljaju kompletan skup kompatibilnih opservabli u prostoru $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Ovi vektori, međutim, nisu svojstveni vektori operatora $\hat{\mathbf{j}}^2$, tako da kvadrat ukupnog momenta u stanjima koja ti vektori opisuju nema određene vrednosti, odnosno u tim stanjima $j$ nije dobar kvantni broj.

Na osnovu izloženog jasno je da je pri proučavanju slaganja momenata nekad pogodnije koristiti prvi, a nekad drugi od navedena dva bazisa. Iz tog razloga potrebno je odrediti unitarnu transformaciju kojom se prelazi sa jednog bazisa na drugi.

### 11.4.2 Klebš-Gordanovi koeficijenti

Razvoj vektora prvog bazisa po vektorima drugog pišemo u obliku

$$|j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} (j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m)\, |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle, \tag{11.91}$$

gde su $(j_1, j_2; m_1, m_2\,|j, m)$ tzv. *Klebš-Gordanovi koeficijenti* (Alfred Clebsch, Paul Gordan). Suma ide po svim vrednostima kvantnih brojeva $m_1$ i $m_2$ koje oni mogu imati za fiksne vrednosti kvantnih brojeva $j_1$ i $j_2$. Prema tome, svaki pojedinačni vektor $|j_1, j_2; j, m\rangle$ razvija se po elementima skupa koji čine svi vektori $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ sa fiksnim vrednostima $j_1$ i $j_2$. Taj skup je potprostor prostora $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ i, pošto $m_1$ i $m_2$ uzimaju $2j_1 + 1$, odnosno $2j_2 + 1$ različitih vrednosti, on je konačne dimenzije $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. U nastavku ćemo videti da je broj članova u razvoju, u stvari, još manji i da se razvoj svodi na sumu samo po jednom od kvantnih brojeva $m_1$ ili $m_2$.

**Teorema:** Klebš-Gordanovi koeficijenti za koje je $m_1 + m_2 \neq m$ jednaki su nuli.

**Dokaz:** Pošto je $|j_1, j_2; j, m\rangle$ svojstveni vektor operatora $\hat{j}_z$, sledi

$$\begin{aligned} \hat{j}_z\, |j_1, j_2; j, m\rangle &= \hbar m |j_1, j_2; j, m\rangle \\ &= \hbar m \sum_{m_1, m_2} (j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m) |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle. \end{aligned} \tag{11.92}$$

S druge strane je

$$
\begin{aligned}
\hat{j}_z\,|j_1,j_2;j,m\rangle &= (\hat{j}_{1z}+\hat{j}_{2z})\sum_{m_1,m_2}(j_1,j_2;m_1,m_2|j,m)\,|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle \\
&= \sum_{m_1,m_2}(j_1,j_2;m_1,m_2|j,m)(\hat{j}_{1z}+\hat{j}_{2z})\,|j_1,m_1\rangle|j_2,m_2\rangle \qquad (11.93)\\
&= \sum_{m_1,m_2}(j_1,j_2;m_1,m_2|j,m)(\hbar m_1+\hbar m_2)\,|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle.
\end{aligned}
$$

Oduzimanjem dobijenih izraza sledi

$$\sum_{m_1,m_2}\hbar(m-m_1-m_2)\,(j_1,j_2;m_1,m_2|j,m)|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle = 0. \qquad (11.94)$$

Pošto su vektori $|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$ linearno nezavisni, gornja suma jednaka je nuli jedino ako su svi koeficijenti koji stoje uz njih jednaki nuli, tj. ako je

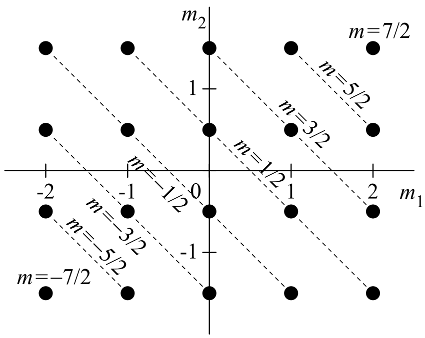
$$\hbar(m-m_1-m_2)(j_1,j_2;m_1,m_2|j,m) = 0, \quad \forall m_1,m_2. \qquad (11.95)$$

Odavde sledi $(j_1,j_2;m_1,m_2|j,m)=0$ ako je $m_1+m_2\neq m$.

Na osnovu ove teoreme, u sumi po $m_1$ i $m_2$ učestvuju jedino sabirci za koje je $m_1+m_2=m$. To znači da je dovoljno sumirati samo po jednom od ta dva kvantna broja, npr. po $m_1$, pri čemu je $m_2=m-m_1$, tj.

$$|j_1,j_2;j,m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1}(j_1,j_2;m_1,m_2{=}m-m_1|j,m)\,|j_1,j_2;m_1,m_2{=}m-m_1\rangle. \qquad (11.96)$$

Na slici 11.1 simbolički su predstavljeni svi vektori $|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$ (kružići) koji ulaze u razvoj stanja $|j_1,j_2;j,m\rangle$ sa fiksnim vrednostima $j_1=2$ i $j_2=3/2$.




**Slika 11.1.** Moguće vrednosti kvantnih brojeva $m_1$ i $m_2$ u stanjima $|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$ sa $j_1=2$ i $j_2=3/2$. Kružići predstavljaju parove $(m_1,m_2)$, a time i pomenuta stanja (s obzirom na to da su kvantni brojevi $j_1$ i $j_2$ fiksni). Kose linije povezuju parove $(m_1,m_2)$ sa istom vrednošću $m=m_1+m_2$. Prema tome, stanja $|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$ povezana kosom linijom za datu vrednost kvantnog broja $m$ ulaze u razvoj stanja $|j_1,j_2;j,m\rangle$.

### 11.4.3 Vrednosti kvantnih brojeva $j$ i $m$ pri slaganju ugaonih momenata sa datim vrednostima $j_1$ i $j_2$

Videli smo da zbog komutiranja operatora $\hat{\mathbf{j}}_1^2$ i $\hat{\mathbf{j}}_2^2$ sa operatorima $\hat{\mathbf{j}}^2$ i $\hat{j}_z$ kvantni brojevi $j_1$, $j_2$, $j$ i $m$ mogu istovremeno imati određene vrednosti. Postavlja se pitanje koje vrednosti mogu imati kvantni brojevi $j$ i $m$ pri fiksnim vrednostima $j_1$ i $j_2$.

Uočimo prvo da, pošto se vektori $|j_1, j_2; j, m\rangle$ mogu predstaviti kao linearne kombinacije vektora $|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$, za koje je $m_1 + m_2 = m$, maximalna vrednost kvantnog broja $m$ iznosi

$$m_{\text{max}} = m_1^{(\text{max})} + m_2^{(\text{max})} = j_1 + j_2. \tag{11.97}$$

S druge strane, pretpostavljajući da za fiksirane vrednosti $j_1$ i $j_2$ postoji više različitih vrednosti kvantnog broja $j$, pri čemu je $j_{\text{max}}$ najveća, $m_{\text{max}}$ mora biti i najveća vrednost iz multipleta (11.27) za $j_{\text{max}}$, tj. $m_{\text{max}} = j_{\text{max}}$. Na osnovu toga i na osnovu relacije (11.97), maksimalna vrednost kvantnog broja $j$ iznosi

$$j_{\text{max}} = j_1 + j_2. \tag{11.98}$$

Sledeća niža vrednost koju uzima $m$ je $j_1 + j_2 - 1$ (tada je $m_1 = j_1$, $m_2 = j_2 - 1$ ili $m_1 = j_1 - 1$, $m_2 = j_2$). Ova vrednost može biti ili vrednost koja prethodi $m_{\text{max}}$ za $j = j_1 + j_2$ ili maksimalna vrednost kvantnog broja $m$ za $j = j_1 + j_2 - 1$. Pošto između $m_{\text{max}} - 1$ i $m_{\text{max}}$ nema drugih vrednosti $m$, sledi da ni $j$ ne može imati vrednosti između $j_1 + j_2 - 1$ i $j_1 + j_2$, dakle $j$ se menja u koracima po 1, tj.

$$j = j_1 + j_2,\ j_1 + j_2 - 1,\ j_1 + j_2 - 2, \dots, j_{\text{min}}. \tag{11.99}$$

Vrednost za $j_{\text{min}}$ odredićemo iz dimenzije potprostora direktnog proizvoda prostora $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, koji čine vektori sa fiksnim vrednostima $j_1$ i $j_2$, i koja je, kao što smo videli, $d = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. S druge strane, $d$ je jednako broju vektora $|j_1, j_2; j, m\rangle$ sa fiksnim vrednostima $j_1$ i $j_2$, koji čine bazis u tom potprostoru, tj. $d = \sum_{j=j_{\text{min}}}^{j_{\text{max}}}(2j + 1)$ (u ovoj sumi $2j + 1$ je broj različitih vrednosti $m$ za dato $j$). Izjednačavanjem ova dva izraza dobijamo jednakost

$$\sum_{j=j_{\text{min}}}^{j_{\text{max}}} (2j + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1). \tag{11.100}$$

Koristeći rezultat $\sum_{j=j_{\text{min}}}^{j_{\text{max}}} j = \sum_{j=1}^{j_{\text{max}}} j - \sum_{j=1}^{j_{\text{min}}-1} j = \frac{1}{2} j_{\text{max}}(j_{\text{max}} + 1) - \frac{1}{2}(j_{\text{min}} - 1)j_{\text{min}}$, nalazimo vrednost sume na levoj strani jednakosti

$$\begin{aligned}
\sum_{j=j_{\text{min}}}^{j_{\text{max}}} (2j + 1) &= 2\sum_{j=j_{\text{min}}}^{j_{\text{max}}} j + \sum_{j=j_{\text{min}}}^{j_{\text{max}}} 1 \\
&= j_{\text{max}}(j_{\text{max}} + 1) - (j_{\text{min}} - 1)j_{\text{min}} + (j_{\text{max}} - j_{\text{min}} + 1) \qquad (11.101) \\
&= j_{\text{max}}(j_{\text{max}} + 2) - j_{\text{min}}^2 + 1.
\end{aligned}$$

Pošto je $j_{\max} = j_1 + j_2$, jednakost (11.101) postaje

$$(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 2) - j_{\min}^2 + 1 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1), \tag{11.102}$$

što se svodi na $j_1^2 - 2j_1 j_2 + j_2^2 - j_{\min}^2 = 0$, odnosno $j_{\min}^2 = (j_1 - j_2)^2$, tj.

$$j_{\min} = |j_1 - j_2|. \tag{11.103}$$

Prema tome, za fiksne vrednosti $j_1$ i $j_2$ kvantni broj $j$ može da ima vrednosti

$$j = |j_1 - j_2|,\ |j_1 - j_2| + 1,\ \ldots,\ j_1 + j_2 - 1,\ j_1 + j_2. \tag{11.104}$$

Ovo je tzv. *pravilo trougla* ($|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$). Uz to, za svako $j$ kvantni broj $m$ uzima vrednosti

$$m = -j,\ -j+1,\ \ldots,\ j-1,\ j. \tag{11.105}$$

### 11.4.4 Relacije među Klebš-Gordanovim koeficijentima sa fiksnim vrednostima $j_1$, $j_2$ i $j$

Razvoj vektora $|j, m\rangle$ po vektorima $|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$ glasi

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} (m_1, m_2|j, m)\,|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle. \tag{11.106}$$

Oznake $|j, m\rangle \equiv |j_1, j_2; j, m\rangle$ i $(m_1, m_2|j, m) \equiv (j_1, j_2; m_1, m_2|j, m)$ uveli smo radi konciznosti. Ako operatorom $\hat{j}_+ = \hat{j}_{1+} + \hat{j}_{2+}$ delujemo na obe strane ove jednakosti, tj.

$$\hat{j}_+\,|j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} (m_1, m_2|j, m)(\hat{j}_{1+} + \hat{j}_{2+})|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle, \tag{11.107}$$

sledi

$$\begin{aligned} &\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,|j, m+1\rangle \\ &\quad = \sum_{m_1, m_2} (m_1, m_2|j, m)\,\sqrt{(j_1-m_1)(j_1+m_1+1)}\,|j_1, m_1+1\rangle|j_2, m_2\rangle \\ &\quad + \sum_{m_1, m_2} (m_1, m_2|j, m)\,\sqrt{(j_2-m_2)(j_2+m_2+1)}\,|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2+1\rangle. \end{aligned} \tag{11.108}$$

Dalje ćemo vektor $|j, m+1\rangle$ na levoj strani jednakosti takođe razviti po vektorima $|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$, a zatim celu jednakost skalarno pomnožiti sa leve strane proizvoljnim vektorom $|j_1, m_1'\rangle|j_2, m_2'\rangle$ iz istog skupa, što daje

$$\begin{aligned} &\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,\sum_{m_1, m_2} (m_1, m_2|j, m+1)\,\delta_{m_1, m_1'}\,\delta_{m_2, m_2'} = \\ &\sum_{m_1, m_2} (m_1, m_2|j, m+1)\,\sqrt{(j_1-m_1)(j_1+m_1+1)}\,\delta_{m_1+1, m_1'}\,\delta_{m_2, m_2'} + \\ &\sum_{m_1, m_2} (m_1, m_2|j, m+1)\,\sqrt{(j_2-m_2)(j_2+m_2+1)}\,\delta_{m_1, m_1'}\,\delta_{m_2+1, m_2'}, \end{aligned} \tag{11.109}$$

odnosno

$$\begin{aligned}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,(m_1', m_2'|j, m+1) = \\ (m_1'-1, m_2'|j, m)\sqrt{(j_1-m_1'+1)(j_1+m_1')} + \\ (m_1', m_2'-1|j, m)\sqrt{(j_2-m_2'+1)(j_2+m_2')}.\end{aligned} \tag{11.110}$$

Ako umesto $m_1'$, $m_2'$ pišemo $m_1$, $m_2$, dobija se

$$\begin{aligned}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,(m_1, m_2|j, m+1) = \\ \sqrt{(j_1+m_1)(j_1-m_1+1)}\,(m_1-1, m_2|j, m) + \\ \sqrt{(j_2+m_2)(j_2-m_2+1)}\,(m_1, m_2-1|j, m).\end{aligned} \tag{11.111}$$

Na sličan način, primenjujući operator $\hat{j}_-$, dobija se

$$\begin{aligned}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,(m_1, m_2|j, m-1) = \\ \sqrt{(j_1-m_1)(j_1+m_1+1)}\,(m_1+1, m_2|j, m) + \\ \sqrt{(j_2-m_2)(j_2+m_2+1)}\,(m_1, m_2+1|j, m).\end{aligned} \tag{11.112}$$

Ovo su rekurentne formule za Klebš-Gordanove koeficijente sa fiksnim vrednostima $j_1$, $j_2$ i $j$.

Iz uslova normiranja vektora $|j, m\rangle$ ($\langle j, m|j, m\rangle = 1$), zahvaljujući ortonormiranosti vektora $|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$, dobijamo vezu

$$\sum_{m_1, m_2} |(j_1, j_2; m_1, m_2|j, m)|^2 = 1. \tag{11.113}$$

Ispostavlja se da su svi Klebš-Gordanovi koeficijenti realni brojevi. Po konvenciji se uzima da je Klebš-Gordanov koeficijent za maksimalno $m$, tj. za $m = j$, i za maksimalno $m_1$, tj. za $m_1 = j_1$ ($m_2 = j - j_1$), pozitivan, dakle

$$(j_1, j_2; j_1, j-j_1|j, j) \geq 0. \tag{11.114}$$

### 11.4.5 Sprezanje dva spina 1/2

Kao prvi primer razmotrićemo ukupan spin dve čestice spina 1/2 (npr. dva elektrona). Tada je $s_1 = s_2 = 1/2$, pa, na osnovu pravila (11.104), kvantni broj ukupnog spina može da ima dve vrednosti

$$S = |s_1 - s_2|, s_1 + s_2 = 0, 1. \tag{11.115}$$

U slučaju $S = 0$ kvantni broj projekcije ukupnog spina iznosi $M_S = 0$, dok su za $S = 1$ moguće tri vrednosti, $M_S = -1, 0, 1$.

U skladu sa opštom teorijom, spinska stanja sa određenim vrednostima kvantnih brojeva $S$ i $M_S$ mogu se razviti po spinskim stanjima sa određenim vrednostima kvantnih $m_{s1}$ i $m_{s2}$

$$|S, M_S\rangle = \sum_{m_{s1}=\pm 1/2} (m_{s1}, m_{s2}=M_S-m_{s1}|S, M_S)|m_{s1}\rangle|m_{s2}=M_S-m_{s1}\rangle, \tag{11.116}$$

pri čemu radi kratkoće koristimo oznake $|S, M_S\rangle \equiv |s_1, s_2; S, M_S\rangle$, $|m_{s1}\rangle \equiv |s_1, m_{s1}\rangle$, $|m_{s2}\rangle \equiv |s_2, m_{s2}\rangle$ i $(m_{s1}, m_{s2}|S, M_S) \equiv (s_1, s_2, m_{s1}, m_{s2}|S, M_S)$. Očigledno, postoje četiri takva spinska stanja

$$|0,0\rangle = (+,-|0,0)|+\rangle_1|-\rangle_2 + (-,+|0,0)|-\rangle_1|+\rangle_2, \tag{11.117}$$

$$|1,-1\rangle = (-,-|1,-1)|-\rangle_1|-\rangle_2, \tag{11.118}$$

$$|1,0\rangle = (+,-|1,0)|+\rangle_1|-\rangle_2 + (-,+|1,0)|-\rangle_1|+\rangle_2, \tag{11.119}$$

$$|1,1\rangle = (+,+|1,1)|+\rangle_1|+\rangle_2, \tag{11.120}$$

gde radi daljeg pojednostavljivanja koristimo oznake $|\pm\rangle_i \equiv |m_{si} = \pm\frac{1}{2}\rangle$, $i = 1, 2$, $(+,-|S, M_S) \equiv (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}|S, M_S)$ itd. Iz uslova normiranja vektora stanja $|1, \pm 1\rangle$ na jedinicu, birajući realne vrednosti Klebš-Gordanovih koeficijenata, sledi

$$(-,-|1,-1) = 1, \quad (+,+|1,1) = 1. \tag{11.121}$$

Polazeći od ovih vrednosti i koristeći rekurentne formule, dalje se dobija

$$(+,-|1,0) = 1/\sqrt{2}, \quad (-,+|1,0) = 1/\sqrt{2}. \tag{11.122}$$

Klebš-Gordanovi koeficijenti koji se pojavljuju u razvoju vektora $|0,0\rangle$ mogu se odrediti iz uslova njegove normiranosti na jedinicu ($\langle 0,0|0,0\rangle = 1$) i ortogonalnosti u odnosu na vektor $|1,0\rangle$ ($\langle 0,0|1,0\rangle = 0$). Birajući realna rešenja, dobija se

$$(+,-|0,0) = 1/\sqrt{2}, \quad (-,+|0,0) = -1/\sqrt{2}. \tag{11.123}$$

Zamenjujući dobijene vrednosti za koeficijente, konačno imamo

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_1|-\rangle_2 - |-\rangle_1|+\rangle_2), \tag{11.124}$$

$$|1,-1\rangle = |-\rangle_1|-\rangle_2, \tag{11.125}$$

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_1|-\rangle_2 + |-\rangle_1|+\rangle_2), \tag{11.126}$$

$$|1,1\rangle = |+\rangle_1|+\rangle_2. \tag{11.127}$$

Prvo navedeno stanje, koje odgovara ukupnom spinu $S = 0$, naziva se *singletno stanje* i ono je antisimetrično u odnosu na izmenu čestica. Preostala tri stanja, koja odgovaraju ukupnom spinu $S = 1$, nazivaju se *tripletna stanja* i ona su simetrična u odnosu pomenutu izmenu. O ovim simetrijama biće reči u narednoj glavi.

### 11.4.6 Sprezanje orbitnog i spinskog momenta elektrona

Ukupni ugaoni moment elektrona predstavlja zbir njegovog orbitnog i spinskog momenta $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$. Zajedničke svojstvene vektore operatora $\hat{\mathbf{j}}^2$ i $\hat{j}_z$, koji su istovremeno i svojstveni vektori operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{\mathbf{s}}^2$, pišemo u obliku $|\,l, s; j, m_j\rangle$, gde su $l$ i $s$ orbitni, odnosno spinski kvantni broj, a $j$ i $m_j$ kvantni brojevi kvadrata, odnosno projekcije ukupnog momenta. Prema pravilu trougla, za fiksne vrednosti $l$ i $s = 1/2$ kvantni broj $j$ može imati samo dve vrednosti

$$j = l \pm 1/2, \tag{11.128}$$

a u s-stanju ($l = 0$) samo jednu: $j = 1/2$.

Saglasno opštoj teoriji, koristeći odgovarajuće Klebš-Gordanove koeficijente, vektore $|l, s; j, m_j\rangle$ možemo razviti po vektorima $|l, m_l\rangle|s, m_s\rangle$ koji opisuju stanja sa određenim vrednostima kvadrata i projekcija orbitnog i spinskog momenta. Vektor stanja koji odgovara maksimalnim vrednostima $j$ i $m_j$ ($j, m_j = l + 1/2$) je

$$|l, \tfrac{1}{2}; l{+}\tfrac{1}{2}, l{+}\tfrac{1}{2}\rangle = (l, \tfrac{1}{2}; l, \tfrac{1}{2}|l{+}\tfrac{1}{2}, l{+}\tfrac{1}{2})|l, l\rangle|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle. \tag{11.129}$$

Klebš-Gordanov koeficijent koji se ovde pojavljuje, zbog realnosti i normiranja stanja na jedinicu, takođe je jednak jedinici. Prema tome, imamo

$$|l, \tfrac{1}{2}; l{+}\tfrac{1}{2}, l{+}\tfrac{1}{2}\rangle = |l, l\rangle|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle. \tag{11.130}$$

Ostali vektori multipleta ($m_j = -j, \dots, j$) dobijaju se višestrukim delovanjem operatora spuštanja $\hat{j}_- = \hat{l}_- + \hat{s}_-$ na vektore sa obe strane jednakosti (sa $\hat{j}_-$ delujemo na levi, a sa $\hat{l}_- + \hat{s}_-$ na desni vektor). Nakon sređivanja dobija se

$$\begin{aligned} |l, \tfrac{1}{2}; l{+}\tfrac{1}{2}, m_j\rangle = & \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}\,|l, m_j{-}\tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle \\ & + \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}\,|l, m_j{+}\tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2}, \text{-}\tfrac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \tag{11.131}$$

Na analogan način za vektore sa $j = l - 1/2$ sledi

$$\begin{aligned} |l, \tfrac{1}{2}; l{-}\tfrac{1}{2}, m_j\rangle = & -\sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}\,|l, m_j{-}\tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle \\ & + \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}\,|l, m_j{+}\tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \tag{11.132}$$

Ova dva izraza mogu se napisati u opštem obliku

$$|l, \tfrac{1}{2}; l{\pm}\tfrac{1}{2}, m_j\rangle = \alpha_\pm\,|l, m_j{-}\tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle + \beta_\pm\,|l, m_j{+}\tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle, \tag{11.133}$$

gde su $\alpha_\pm = \pm\beta_\mp = \pm\sqrt{(l \pm m_j{+}1/2)/(2l+1)}$.

Reprezentujući orbitna stanja $|l, m_l\rangle$ sfernim harmonicima $Y_{lm_l}$, a spinska stanja $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ matricama kolonama, svojstvena stanja operatora ukupnog momenta za $j = l \pm \frac{1}{2}$ biće predstavljena spinorima

$$|l, \tfrac{1}{2}; l\pm\tfrac{1}{2}, m_j\rangle \to \alpha_\pm\, Y_l^{m_j-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta_\pm\, Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_\pm\, Y_l^{m_j-\frac{1}{2}} \\ \beta_\pm\, Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \tag{11.134}$$

Postavlja se pitanje zbog čega se za opis stanja elektrona koriste kvantni brojevi ukupnog ugaonog momenta $j$ i $m_j$ (uz $l$ i $s = 1/2$), a ne kvantni brojevi orbitnog i spinskog momenta ($l$, $m_l$, $s$, $m_s$). Razlog za to je *spin-orbitna interakcija*, koja predstavlja jedan od relativističkih efekata. Ako se elektron nalazi u centralnosimetričnom potencijalu $V(r)$, član u hamiltonijanu koji opisuje spin-orbitnu interakciju ima oblik

$$\hat{H}_{ls} = \frac{1}{2m_e^2c^2}\, \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}\, \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}. \tag{11.135}$$

Ukupan hamiltonijan elektrona tada je

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{ls}, \tag{11.136}$$

gde je $\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/2 + V(r)$. S obzirom na to da $\hat{H}_0$ komutira sa operatorima $\hat{\mathbf{l}}^2$, $\hat{l}_z$, $\hat{\mathbf{s}}^2$, $\hat{s}_z$, ako zanemarimo spin-orbitnu interakciju, dobri kvantni brojevi za opis stanja elektrona u potencijalu $V$ biće $n$, $l$, $m_l$, $s$ i $m_s$. Pri tome, operator $\hat{H}_{ls}$ takođe komutira sa $\hat{H}_0$, $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{\mathbf{s}}^2$, ali pošto ne komutira sa $\hat{l}_z$ i $\hat{s}_z$, za sistem opisan ukupnim hamiltonijanom $m_l$ i $m_s$ nisu dobri kvantni brojevi. S druge strane, operatori $\hat{H}_0$ i $\hat{H}_{ls}$ ($\sim \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$), a time i $\hat{H}$, komutiraju sa operatorima $\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{\mathbf{l}}^2 + 2\,\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} + \hat{\mathbf{s}}^2$ i $\hat{j}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z$ tako da su $n$, $l$, $s$, $j$ i $m_j$ generalno dobri kvantni brojevi, bez obzira na to da li je spin-orbitna interakcija uzeta u obzir ili nije. Drugim rečima, stanja u kojima elektron istovremeno ima određene vrednosti energije, kvadrata orbitnog momenta, spina i ukupnog ugaonog momenta, kao i z-projekcije ukupnog momenta uvek su moguća, dok o stanjima u kojima on istovremeno ima određene vrednosti energije, kvadrata orbitnog momenta i spina, te njihovih z-projekcija možemo govoriti samo ako se spin-orbitna interakcija zanemari.

Pošto je spin-orbitna interakcija znatno slabija od Kulonove interakcije elektrona sa jezgrom atoma i sa ostalim elektronima, njen uticaj na energijske nivoe atoma možemo odrediti koristeći perturbacioni metod. Ako su npr. $E_n^{(0)}$ energijski nivoi atoma sa jednim elektronom bez spin-orbitne interakcije (dakle, svojstvene energije hamiltonijana $\hat{H}_0$), onda odgovarajući nivoi sa uračunatom spin-orbitnom interakcijom (svojstvene energije hamiltonijana $\hat{H}$) glase

$$E = E_n^{(0)} + \Delta E, \tag{11.137}$$

gde je $\Delta E$ popravka na energiju $E_n^{(0)}$ zbog prisustva spin-orbitne interakcije, koja se u okviru teorije perturbacija prvog reda računa kao srednja vrednost operatora $\hat{H}_{ls}$ u stanjima $\psi_{nljm_j}$, dakle $\Delta E = \langle \hat{H}_{ls} \rangle \equiv \langle \psi_{nljm_j} | \hat{H}_{ls} | \psi_{nljm_j} \rangle$ (v. odeljak 10.2.3 i formulu (10.18)). Stanje $\psi_{nljm_j}$ može se reprezentovati proizvodom radijalne funkcije $R_{nl}(r)$

i gore navedenog spinora koji opisuje ugaoni i spinski deo tog stanja, a za atom sa jednim elektronom je $V = -Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$, tako da imamo

$$\langle \hat{H}_{ls} \rangle = \frac{1}{2m_e^2c^2}\,\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\,\langle l,\tfrac{1}{2};j,m_j|\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}|l,\tfrac{1}{2};j,m_j\rangle \int_0^\infty r^2\mathrm{d}\,r\,[R_{nl}(r)]^2\frac{1}{r^3}. \tag{11.138}$$

Radijalni integral iznosi $\langle 1/r^3\rangle = Z^3/[a_0^3n^3l(l+\frac{1}{2})(l+1)]$, gde je $a_0$ Borov radijus, dok je

$$\langle \hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}\rangle = \Big\langle l,\tfrac{1}{2};j,m_j\Big|\tfrac{1}{2}\big(\hat{\mathbf{j}}^2-\hat{\mathbf{l}}^2-\hat{\mathbf{s}}^2\big)\Big|l,\tfrac{1}{2};j,m_j\Big\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\Big[j(j+1)-l(l+1)-\tfrac{3}{4}\Big], \tag{11.139}$$

odnosno za $j = l \pm \frac{1}{2}$

$$\langle \hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\Big[(l\pm\tfrac{1}{2})(l\pm\tfrac{1}{2}+1)-l(l+1)-\tfrac{3}{4}\Big] = \frac{\hbar^2}{2}\Big(\pm l-\tfrac{1}{2}\pm\tfrac{1}{2}\Big) = \frac{\hbar^2}{2}\begin{cases} l \\ -l-1 \end{cases}, \tag{11.140}$$

pri čemi je za $l = 0$ isključivo $\langle\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}\rangle = 0$. Konačno, popravka energije zbog prisustva spin-orbitne interakcije za $j = l \pm \frac{1}{2}$ (slučaj $l \neq 0$) iznosi

$$\Delta E = \frac{m_e c^2(Z\alpha)^4}{4n^3l(l+\frac{1}{2})(l+1)}\begin{cases} l \\ -l-1 \end{cases}, \tag{11.141}$$

odnosno $\Delta E = 0$ za $l = 0$. Ovde je $\alpha = e^2/(4\pi\varepsilon_0\hbar c)$ tzv. *konstanta fine strukture*. Vidimo da kao posledica spin-orbitne interakcije energijski nivoi zavise, osim od glavnog kvantnog broja $n$, i od orbitnog kvantnog broja $l$, i pri tome se svaki nivo (osim ako je $l = 0$) cepa na dva podnivoa za dve vrednosti kvantnog broja $j$ (tzv. dublet).

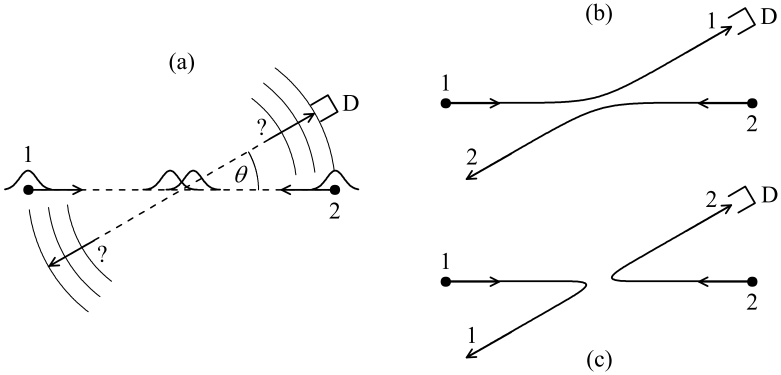
# 12 Sistemi identičnih čestica

## 12.1 Simetrija talasne funkcije sistema identičnih čestica u odnosu na izmenu čestica

### 12.1.1 Princip nerazlikovanja identičnih čestica

Identičnim česticama nazivamo čestice koje nemaju nijednu svojstvenu osobinu po kojoj bi se međusobno razlikovale. Kada su u pitanju elementarne čestice, takvih osobina ima svega nekoliko: masa, naelektrisanje, spin, žiromagnetni odnosi itd. Naglasimo da se ovde ne ubrajaju dinamičke veličine (položaj, impuls, projekcija spina i veličine izvedene iz njih), dakle promenljive koje određuju stanje čestice. Npr. svi elektroni imaju jednake osobine i, prema tome, oni su identične čestice. U klasičnoj mehanici proučavanje sistema identičnih čestica ne predstavlja bitno drugačiji problem u odnosu na slučaj kada su čestice različite. U tom opisu svaka čestica se kreće duž dobro definisane trajektorije, što nam omogućava da ih sve vreme možemo razlikovati. U kvantnoj mehanici situacija je bitno drugačija. Čestice nemaju određene trajektorije i, ako su identične, nema načina da ih u toku evolucije razlikujemo.

Radi ilustracije razmotrimo sudar dve identične čestice (slika 12.1). Stanja čestica pre sudara opisana su sa dva odvojena talasna paketa koji se kreću jedan prema drugom (slika 12.1(a)). Čestica na levoj strani označena je sa 1, a ona na desnoj sa 2. Tokom sudara dva talasna paketa se preklapaju i u toj oblasti prostora verovatnoća nalaženja obe čestice je različita od nule. Nakon sudara ta oblast se širi i ima oblik sfernog omotača, čiji se poluprečnik vremenom povećava. Pretpostavimo da detektor D, koji leži na osi koja pod uglom $\theta$ seče osu sudara, detektuje rasejanu česticu. Tada, zahvaljujući održanju ukupnog impulsa, znamo da se druga čestica udaljava u suprotnom smeru. Međutim, ono što nije moguće utvrditi je to da li je čestica koju je detektor D detektovao ona koja je prvobitno označena brojem 1 ili ona sa brojem 2. Očigledno, postoje dva različita „puta” kojima bi sistem mogao da pređe iz početnog stanja u konačno, ali zbog preklapanja talasnih paketa u zoni sudara i nakon toga nije moguće utvrditi kojim se putem taj prelaz vrši. Dva moguća puta su šematski prikazana na slikama 12.1(b) i 12.1(c). Postavlja se pitanje kako u tom slučaju talasna funkcija konačnog stanja ovog dvočestičnog sistema (nakon detekcije čestica) glasi. Stanja koja bi odgovarala slučajevima sa slika 12.1(b) i 12.1(c) su različita, štaviše međusobno ortogonalna, ali je nemoguće zamisliti potpunije merenje kojim bi se utvrdilo da se dvočestični sistem nalazi u jednom od njih. Dakle, tim dvema mogućnostima, u kojima su česticama zamenjena mesta (i u konfiguracionom i u spinskom prostoru), treba pripisati jedno kvantno stanje, a to može biti superpozicija pomenutih stanja.




**Slika 12.1.** (a) Sudar dve identične čestice čija su stanja pre sudara opisana sa dva odvojena talasna paketa i koje se stoga inicijalno mogu označiti sa 1 i 2. Tokom sudara dva talasna paketa se preklapaju, a nakon sudara verovatnoća nalaženja čestica je različita od nule u sfernoj oblasti čiji se radijus vremenom povećava. Pošto su čestice identične, kada se jedna od njih detektuje na detektoru D, nemoguće je utvrditi da li se radi o čestici koja je pre sudara označena sa 1 ili sa 2. (b, c) Šematski prikaz dva puta kojima sistem može da pređe iz početnog stanja u krajnje stanje određeno merenjem.

U nastavku ćemo izložiti kvantnomehanički formalizam koji je prilagođen opisu sistema identičnih čestica. On sledi iz principa nerazlikovanja identičnih čestica koji se može formulisati na sledeći način: *Stanje sistema identičnih čestica nakon izmene bilo koje dve čestice ostaje nepromenjeno.* To znači da se talasna funkcija sistema nakon izmene čestica može razlikovati od prvobitne talasne funkcije samo po faznom faktoru. Razmotrićemo prvo sistem koji se sastoji od dve identične čestice, a onda analizu uopštiti na sistem sa proizvoljnim brojem čestica.

## 12.1.2 Simetrija talasne funkcije sistema od dve identične čestice

Ako je $\psi(\xi_1, \xi_2)$ talasna funkcija sistema koji se sastoji od dve identične čestice, gde $\xi_1$ i $\xi_2$ označavaju skupove od po tri prostorne koordinate i jedne spinske promenljive (projekcija spina) za svaku česticu, onda na osnovu principa nerazlikovanja identičnih čestica mora biti

$$\psi(\xi_2, \xi_1) = \lambda\psi(\xi_1, \xi_2), \tag{12.1}$$

gde je $\lambda = e^{i\alpha}$ fazni faktor ($\alpha$ je realan broj). Ako uvedemo *operator izmene* prve i druge čestice $\hat{P}_{12}$, koji deluje na dvočestičnu talasnu funkciju $\psi(\xi_1, \xi_2)$ kao

$$\hat{P}_{12}\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_2, \xi_1), \tag{12.2}$$

uslov (12.1) može se napisati u obliku

$$\hat{P}_{12}\psi(\xi_1, \xi_2) = \lambda\psi(\xi_1, \xi_2). \tag{12.3}$$

Učimo prvo da, pošto funkcije $\psi(\xi_1,\xi_2)$ i $\psi(\xi_2,\xi_1)$ imaju istu normu, transformacija (12.2) je unitarna. Drugo, jednakost (12.3) ima oblik svojstvenog problema operatora $\hat{P}_{12}$, odakle zaključujemo da talasne funkcije $\psi(\xi_1,\xi_2)$, koje opisuju stanja sistema od dve identične čestice, moraju biti *svojstvene funkcije operatora izmene*.

Da bismo odredili svojstvene vrednosti i svojstvene funkcije operatora izmene $\hat{P}_{12}$, ispitaćemo kako kvadrat tog operatora deluje na funkcije $\psi(\xi_1,\xi_2)$. Delujući dva puta uzastopno operatorom $\hat{P}_{12}$ na dvočestičnu funkciju po pravilu (12.2), dobijamo

$$\hat{P}_{12}^2\psi(\xi_1,\xi_2) = \hat{P}_{12}\hat{P}_{12}\psi(\xi_1,\xi_2) = \hat{P}_{12}\psi(\xi_2,\xi_1) = \psi(\xi_1,\xi_2). \tag{12.4}$$

Odavde, zbog proizvoljnosti funkcije $\psi(\xi_1,\xi_2)$, sledi da je $\hat{P}_{12}^2 = \hat{I}$, tj. operator $\hat{P}_{12}$ sam je sebi inverzan, a pošto je unitaran, onda je i ermitski. S druge strane, ako je $\psi(\xi_1,\xi_2)$ svojstvena funkcija operatora izmene, biće

$$\hat{P}_{12}^2\psi(\xi_1,\xi_2) = \hat{P}_{12}\hat{P}_{12}\psi(\xi_1,\xi_2) = \hat{P}_{12}\lambda\psi(\xi_1,\xi_2) = \lambda^2\psi(\xi_1,\xi_2). \tag{12.5}$$

Poredeći ovaj rezultat sa rezultatom (12.4) za proizvoljnu funkciju $\psi(\xi_1,\xi_2)$, sledi $\lambda^2 = 1$. Prema tome, svojstvene vrednosti operatora $\hat{P}_{12}$ su

$$\lambda = \pm 1, \tag{12.6}$$

a iz uslova (12.1) dalje sledi da su odgovarajuće svojstvene funkcije *simetrične funkcije* $\psi_\mathrm{s}$, za koje važi $\psi_\mathrm{s}(\xi_2,\xi_1) = \psi_\mathrm{s}(\xi_1,\xi_2)$, odnosno *antisimetrične funkcije* $\psi_\mathrm{a}$, za koje važi $\psi_\mathrm{a}(\xi_2,\xi_1) = -\psi_\mathrm{a}(\xi_1,\xi_2)$. Dakle,

$$\hat{P}_{12}\psi_\mathrm{s}(\xi_1,\xi_2) = \psi_\mathrm{s}(\xi_1,\xi_2), \tag{12.7}$$

$$\hat{P}_{12}\psi_\mathrm{a}(\xi_1,\xi_2) = -\psi_\mathrm{a}(\xi_1,\xi_2). \tag{12.8}$$

Na osnovu gornje analize zaključujemo da skup uslova koje talasna funkcija treba da zadovoljava da bi opisivala stanje kvantnog sistema (jednoznačnost, kvadratna integrabilnost i neprekidnost, v. odeljak 2.1.5) u slučaju sistema koji se sastoji od dve ili više identičnih čestica nije dovoljan. Dodatni uslov je simetrija talasne funkcije u odnosu na izmenu čestica.

Osim simetrije talasne funkcije, posledica principa nerazlikovanja identičnih čestica takođe je invarijantnost hamiltonijana u odnosu na izmenu čestica. Naime, relacije (12.7) i (12.8) mogu se tumačiti kao invarijantnost (do na znak) talasne funkcije sa određenom simetrijom pod unitarnom transformacijom reprezentovanom operatorom izmene $\hat{P}_{12}$. Ako ovim operatorom delujemo na obe strane Šredingerove jednačine koja opisuje evoluciju sistema od dve identične čestice

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\xi_1,\xi_2,t) = \hat{H}\psi(\xi_1,\xi_2,t), \tag{12.9}$$

u jednačini će nakon transformacije figurisati ista talasna funkcija, a hamiltonijan $\hat{H}$ biće zamenjen hamiltonijanom $\hat{H}' = \hat{P}_{12}\hat{H}\hat{P}_{12}^{-1}$. Pošto su fizički zakoni invarijantni pod unitarnim transformacijama, odavde sledi da mora biti $\hat{H}' = \hat{H}$.

Napomenimo da talasna funkcija $\psi(\xi_1, \xi_2)$, koja je rešenje Šredingerove jednačine za sistem od dve identične čestice, ne mora automatski imati određenu simetriju u odnosu na izmenu čestica. Međutim, zbog invarijantnosti hamiltonijana u odnosu na tu izmenu rešenje jednačine je i funkcija $\psi(\xi_2, \xi_1)$, a rešenja su i sve linearne kombinacije ove dve funkcije, u koje spadaju i simetrična i antisimetrična kombinacija

$$\psi_{\mathrm{s}} = C_{\mathrm{s}}[\psi(\xi_1, \xi_2) + \psi(\xi_2, \xi_1)], \tag{12.10}$$

$$\psi_{\mathrm{a}} = C_{\mathrm{a}}[\psi(\xi_1, \xi_2) - \psi(\xi_2, \xi_1)], \tag{12.11}$$

gde su $C_{\mathrm{s}}$ i $C_{\mathrm{a}}$ konstante normiranja. Na ovaj način se, polazeći od rešenja Šredingerove jednačine koja nemaju određenu simetriju, konstruišu rešenja koja su simetrična, odnosno antisimetrična.

### 12.1.3 Simetrija talasne funkcije sistema sa proizvoljnim brojem identičnih čestica

Neka je $\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)$ talasna funkcija sistema koji se sastoji od $N$ identičnih čestica, pri čemu $\xi_i$ označava skup od tri prostorne koordinate i jedne spinske promenljive (projekcija spina) za $i$-tu česticu. Zbog principa nerazlikovanja identičnih čestica ova funkcija pri izmeni bilo koje dve čestice može da promeni samo fazni faktor, tj. mora da važi

$$\psi(\xi_1, \ldots, \xi_j, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_N) = \lambda_{ij}\psi(\xi_1, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_j, \ldots, \xi_N), \tag{12.12}$$

za sve $i, j = 1, \ldots, N$ i $i \neq j$, gde su $\lambda_{ij} = e^{i\alpha_{ij}}$ fazni faktori ($\alpha_{ij}$ su realni brojevi).

Ako uvedemo *operator izmene* (transpozicije) $i$-te i $j$-te čestice $\hat{P}_{ij}$, koji na sledeći način deluje na proizvoljno $N$-čestično stanje $\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)$

$$\hat{P}_{ij}\psi(\xi_1, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_j, \ldots, \xi_N) = \psi(\xi_1, \ldots, \xi_j, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_N), \tag{12.13}$$

uslov (12.12) se može napisati u obliku

$$\hat{P}_{ij}\psi(\xi_1, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_j, \ldots, \xi_N) = \lambda_{ij}\psi(\xi_1, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_j, \ldots, \xi_N). \tag{12.14}$$

Prema tome, talasna funkcija koja opisuje stanje sistema od $N$ identičnih čestica mora biti *svojstvena funkcija operatora izmene* $\hat{P}_{ij}$ za *svaki* par čestica. Kao i $\hat{P}_{12}$, operatori $\hat{P}_{ij}$ su unitarni, sami sebi inverzni (tj. $\hat{P}_{ij}^2 = \hat{I}$), ermitski i imaju dve svojstvene vrednosti $\lambda_{ij} = \pm 1$, a odgovarajuće svojstvene funkcije su *simetrične*, odnosno *antisimetrične* u odnosu na izmenu $i$-te i $j$-te (i bilo koje druge dve) čestice.

Hamiltonijan sistema sa proizvoljnim brojem identičnih čestica $\hat{H}$ takođe mora biti invarijantan na izmenu bilo kog para čestica, tj. $\hat{H} = \hat{H}'$, gde je $\hat{H}' = \hat{P}_{ij}\hat{H}\hat{P}_{ij}^{-1}$, što se može napisati u obliku $\hat{H}\hat{P}_{ij} = \hat{P}_{ij}\hat{H}$, odnosno

$$[\hat{H}, \hat{P}_{ij}] = 0. \tag{12.15}$$

Kao što je poznato, posledica komutiranja dva operatora jeste da oni imaju zajednički potpun skup svojstvenih funkcija. Prema tome, svojstvene funkcije hamiltonijana $\hat{H}$ koji komutira sa operatorima $\hat{P}_{ij}$ biće istovremeno i svojstvene funkcije tih operatora. Operator koji komutira sa operatorima izmene svakog para čestica naziva se *simetrični operator*. Pokazuje se da je hamiltonijan oblika $\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{T}_i + \hat{V}$, gde su $\hat{T}_i$ operatori kinetičke energije pojedinačnih identičnih čestica, a $\hat{V}$ operator potencijalne energije sistema, simetričan operator ukoliko je operator $\hat{V}$ simetričan. Ako se interakcija u sistemu svodi na interakcije svih čestica tog sistema sa spoljašnjom silom i na međusobne dvočestične interakcije, onda je operator $\hat{V}$ simetričan.

Pokazaćemo na kraju kako se konstruišu talasne funkcije koje su simetrične ili antisimetrične u odnosu na izmenu svakog para identičnih čestica sistema. Pretpostavimo da je funkcija $\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)$ rešenje svojstvenog problema odgovarajućeg hamiltonijana (tj. rešenje vremenski nezavisne Šredingerove jednačine) koje nema određenu simetriju u odnosu na izmenu čestica i neka je $\hat{P}$ operator proizvoljne permutacije čestica. U sistemu od $N$ identičnih čestica moguće je izvršiti $N!$ različitih permutacija. Proizvoljna permutacija uvek se može dobiti pomoću uzastopnih permutacija parova (transpozicija) elemenata datog skupa, u ovom slučaju čestica. Ova dekompozicija nije jedinstvena, ali je parnost broja transpozicija za različite dekompozicije iste permutacije uvek ista i naziva se *parnost permutacije*. Tada se odgovarajuća *simetrična*, odnosno *antisimetrična funkcija* konstruišu kao sume

$$\psi_{\mathrm{s}} = C_{\mathrm{s}} \sum \hat{P}\, \psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N), \tag{12.16}$$

$$\psi_{\mathrm{a}} = C_{\mathrm{a}} \sum (-1)^{\nu(\hat{P})} \hat{P}\, \psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N), \tag{12.17}$$

u kojima se sumira po svih $N!$ funkcija koje odgovaraju različitim mogućim permutacijama $N$ čestica sistema. Ovde $\nu(\hat{P})$ predstavlja broj transpozicija neke dekompozicije permutacije $\hat{P}$, tj. koeficijent $(-1)^{\nu(\hat{P})}$ ima vrednost $+1$ za parne i $-1$ za neparne permutacije, a $C_{\mathrm{s}}$ i $C_{\mathrm{a}}$ su konstante normiranja.

### 12.1.4 Postulat o stanjima sistema identičnih čestica

Eksperimenti su pokazali da su stanja sistema od dva ili više elektrona, protona ili neutrona uvek opisana antisimetričnim talasnim funkcijama. S druge strane, sistem koji se sastoji od alfa čestica opisan je simetričnim talasnim funkcijama. Prema tome, talasne funkcije sistema određene vrste čestica su ili isključivo simetrične ili isključivo antisimetrične. Kao što je poznato, elektroni, protoni i neutroni su fermioni, tj. imaju polucelobrojan spin (v. poglavlje 11.3). S druge strane, alfa čestice su bozoni, tj. čestice sa celobrojnim spinom. Pokazalo se da simetrija ukupne talasne funkcije koja opisuje i orbitni i spinski deo stanja sistema identičnih čestica zavisi upravo od celobrojnosti spina date vrste čestica i ta veza je data sledećim postulatom.

**VIII postulat:** Stanja sistema identičnih čestica sa polucelobrojnim spinom (fermioni) opisana su antisimetričnim talasnim funkcijama ili antisimetričnim vektorima stanja, dok su stanja onih sa celobrojnim spinom (bozoni) opisana simetričnim talasnim funkcijama ili simetričnim vektorima stanja.

## 12.2 Konstrukcija talasnih funkcija stacionarnih stanja sistema identičnih čestica

U ovom poglavlju ćemo pokazati kako se od funkcija jednočestičnih stanja konstruišu prvo nesimetrizovane talasne funkcije stacionarnih stanja sistema identičnih čestica bez međusobne interakcije, zatim odgovarajuće simetrizovane funkcije i, konačno, talasne funkcije realističnog sistema identičnih čestica sa međusobnom interakcijom.

### 12.2.1 Nesimetrizovane funkcije stacionarnih stanja sistema neinteragujućih identičnih čestica

Hamiltonijan $\hat{H}_0$ sistema koji se sastoji od $N$ neinteragujućih identičnih čestica može se predstaviti u obliku sume jednočestičnih hamiltonijana $\hat{H}_i$, $i = 1, \ldots, N$, koji su međusobno ekvivalentni, tj. predstavljaju iste funkcije $h$ osnovnog skupa opservabli čestica $\hat{\mathbf{r}}_i$, $\hat{\mathbf{p}}_i$, $\hat{s}_{zi}$. Dakle,

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i, \tag{12.18}$$

gde su $\hat{H}_i \equiv h(\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{p}}_i, \hat{s}_{zi})$. Pošto hamiltonijan $\hat{H}_i$ deluje u prostoru stanja $i$-te čestice $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_i^{(o)} \otimes \mathcal{H}_i^{(s)}$, a hamiltonijan $\hat{H}_0$ u prostoru $\mathcal{H}_{1\ldots N} = \mathcal{H}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_N$, jednočestične hamiltonijane pre sumiranja moramo modifikovani tako da takođe deluju u prostoru $\mathcal{H}_{1\ldots N}$. Ovo se postiže množenjem svakog od njih jediničnim operatorima iz prostora stanja preostalih $N-1$ čestica, tj. zamenom $\hat{H}_i \to \hat{I}_1 \otimes \cdots \otimes \hat{H}_i \otimes \cdots \otimes \hat{I}_N$. Međutim, radi jednostavnosti hamiltonijan $\hat{H}_0$ pisaćemo i dalje u gore navedenom obliku, podrazumevajući da su $\hat{H}_i$ ovako modifikovani operatori.

Svojstveni problem hamiltonijana (12.18)

$$\hat{H}_0 \psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) = E^{(0)} \psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) \tag{12.19}$$

može se rešiti polazeći od rešenja svojstvenih problema jednočestičnih hamiltonijana

$$\hat{H}_i \varphi_{n_i}(\xi_i) = \varepsilon_{n_i} \varphi_{n_i}(\xi_i), \quad i = 1, \ldots, N, \tag{12.20}$$

koja su ekvivalentna za svih $N$ čestica. Indeksi $n_i$ označavaju skupove kvantnih brojeva koji karakterišu jednočestične svojstvene funkcije $\varphi_{n_i}(\xi_i)$ i energije $\varepsilon_{n_i}$. Ako pretpostavimo da svojstvene funkcije hamiltonijana $\hat{H}_0$, koje opisuju stacionarna stanja odgovarajućeg sistema, imaju oblik proizvoda jednočestičnih funkcija, tj.

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) = \varphi_{n_1}(\xi_1) \varphi_{n_2}(\xi_2) \cdots \varphi_{n_N}(\xi_N), \tag{12.21}$$

dejstvo hamiltonijana na te funkcije je

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 \psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) &= \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i \varphi_{n_1}(\xi_1) \cdots \varphi_{n_i}(\xi_i) \cdots \varphi_{n_N}(\xi_N) \\ = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i \varphi_{n_1}(\xi_1) \cdots \varphi_{n_i}(\xi_i) \cdots \varphi_{n_N}(\xi_N) &= \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i \psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N). \end{aligned} \tag{12.22}$$

Vraćajući poslednji izraz na levu stranu jednačine (12.19), sledi da ukupna energija sistema u stanju (12.21) iznosi

$$E^{(0)} = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_{n_i}. \tag{12.23}$$

Prema tome, funkcija (12.21) jeste svojstvena funkcija hamiltonijana $\hat{H}_0$, a energija (12.23) je odgovarajuća svojstvena energija.

Funkcije (12.21) nemaju određenu simetriju u odnosu na izmenu čestica, sem ako su skupovi kvantnih brojeva $n_i$ za sve čestice isti. Međutim, svakoj od njih, koristeći formule (12.16) i (12.17), može se pridružiti po jedna simetrična i jedna antisimetrična funkcija koje su svojstvene funkcije hamiltonijana $\hat{H}_0$ za istu svojstvenu energiju $E^{(0)}$, kao i nesimetrizovana funkcija. Razmotrićemo opet prvo dvočestični sistem, a zatim sistem sa proizvoljnim brojem identičnih čestica.

### 12.2.2 Simetrizacija funkcija stacionarnih stanja sistema od dve neinteragujuće identične čestice

Svojstvene funkcije hamiltonijana $\hat{H}_0$ dvočestičnog sistema dobijamo simetrizacijom funkcija $\psi(\xi_1, \xi_2) = \varphi_{n_1}(\xi_1)\varphi_{n_2}(\xi_2)$, koje nemaju određenu simetriju (sem kada je $n_1 = n_2$), pomoću formula (12.10) i (12.11). Dakle,

$$\psi_{\mathrm{s,a}} = C_{\mathrm{s,a}}[\varphi_{n_1}(\xi_1)\varphi_{n_2}(\xi_2) \pm \varphi_{n_1}(\xi_2)\varphi_{n_2}(\xi_1)]. \tag{12.24}$$

Kvadrati norme ovih funkcija su

$$\begin{aligned} ||\psi_{\mathrm{s,a}}||^2 = |C_{\mathrm{s,a}}|^2 \int\int \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2\, &[\varphi^*_{n_1}(\xi_1)\varphi^*_{n_2}(\xi_2) \pm \varphi^*_{n_1}(\xi_2)\varphi^*_{n_2}(\xi_1)] \\ &\times [\varphi_{n_1}(\xi_1)\varphi_{n_2}(\xi_2) \pm \varphi_{n_1}(\xi_2)\varphi_{n_2}(\xi_1)], \end{aligned}$$

pri čemu je $\int \mathrm{d}\xi_i \equiv \sum_{s_{zi}} \iiint \mathrm{d}^3\vec{r}_i$. Ako su funkcije $\varphi_{n_i}(\xi_i)$ normirane na jedinicu, sledi

$$\begin{aligned} ||\psi_{\mathrm{s,a}}||^2 = |C_{\mathrm{s,a}}|^2 \Bigg[ &\iint \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2 \varphi^*_{n_1}(\xi_1)\varphi^*_{n_2}(\xi_2)\varphi_{n_1}(\xi_1)\varphi_{n_2}(\xi_2) \\ \pm &\iint \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2 \varphi^*_{n_1}(\xi_1)\varphi^*_{n_2}(\xi_2)\varphi_{n_1}(\xi_2)\varphi_{n_2}(\xi_1) \\ \pm &\iint \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2 \varphi^*_{n_1}(\xi_2)\varphi^*_{n_2}(\xi_1)\varphi_{n_1}(\xi_1)\varphi_{n_2}(\xi_2) \\ + &\iint \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2 \varphi^*_{n_1}(\xi_2)\varphi^*_{n_2}(\xi_1)\varphi_{n_1}(\xi_2)\varphi_{n_2}(\xi_1) \Bigg] \\ = |C_{\mathrm{s,a}}|^2\, [1 \pm \delta_{n_1,n_2} \pm \delta_{n_1,n_2} + 1] &= 2(1 \pm \delta_{n_1,n_2})|C_{\mathrm{s,a}}|^2. \end{aligned}$$

Uslov normiranja na jedinicu $||\psi_{s,a}||^2 = 1$ za simetrične funkcije daje $C_{\mathrm{s}} = 1/\sqrt{2}$ za $n_1 \neq n_2$ i $C_{\mathrm{s}} = 1/2$ za $n_1 = n_2$, dok za antisimetrične funkcije sledi $C_{\mathrm{a}} = 1/\sqrt{2}$ za $n_1 \neq n_2$, a za $n_1 = n_2$ funkcija se ne može normirati jer je tada $||\psi_{\mathrm{a}}||^2 = 0$.

Prema tome, simetrične i antisimetrične talasne funkcije stacionarnih stanja sistema od dve neinteragujuće identične čestice, izražene preko jednočestičnih funkcija, glase

$$\psi_s = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{n_1}(\xi_1)\varphi_{n_2}(\xi_2) + \varphi_{n_1}(\xi_2)\varphi_{n_2}(\xi_1)] & \text{za } n_1 \neq n_2, \\ \varphi_n(\xi_1)\varphi_n(\xi_2) & \text{za } n_1 = n_2 \equiv n \end{cases} \tag{12.25}$$

i

$$\psi_a = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{n_1}(\xi_1)\varphi_{n_2}(\xi_2) - \varphi_{n_1}(\xi_2)\varphi_{n_2}(\xi_1)] & \text{za } n_1 \neq n_2, \\ 0 & \text{za } n_1 = n_2. \end{cases} \tag{12.26}$$

Uočimo da se antisimetrična talasna funkcija može napisati u obliku

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_{n_1}(\xi_1) & \varphi_{n_1}(\xi_2) \\ \varphi_{n_2}(\xi_1) & \varphi_{n_2}(\xi_2) \end{vmatrix}, \tag{12.27}$$

koji uključuje i slučaj $n_1 = n_2$ kada je vrednost determinante jednaka nuli. Rezultat $\psi_a = 0$ za $n_1 = n_2$ ukazuje da se u sistemu koji se sastoji od dva *fermiona* istog tipa (npr. dva elektrona) ne mogu obe čestice naći u istom jednočestičnom stanju jer je u tom slučaju gustina verovatnoće $\rho(\xi_1, \xi_2) = |\psi_a(\xi_1, \xi_2)|^2$ svuda jednaka nuli.

### 12.2.3 Simetrizacija funkcija stacionarnih stanja sistema sa proizvoljnim brojem neinteragujućih identičnih čestica. Paulijev princip

**(i) Bozoni**. Polazeći od nesimetrizovane funkcije (12.21) i koristeći formulu (12.16), sledi da su svojstvene funkcije hamiltonijana sistema od $N$ neinteragujućih identičnih bozona predstavljene simetričnim funkcijama oblika

$$\psi_s = C_s \sum \hat{P} \varphi_{n_1}(\xi_1)\varphi_{n_2}(\xi_2)\cdots\varphi_{n_N}(\xi_N). \tag{12.28}$$

Suma ide po svim permutacijama od $N$ elemenata. Ako se u istom jednočestičnom stanju $\varphi_{n_i}(\xi_i)$ nalazi $N_i$ čestica, onda je

$$|\psi_s|^2 = |C_s|^2 \frac{N!}{N_1!N_2!\cdots N_N!}. \tag{12.29}$$

Ako je talasna funkcija $\psi_s$ normirana na jednicu, sledi da je $|C_s| = \sqrt{(\prod_{i=1}^N N_i!)/N!}$, odnosno

$$\psi_s = \sqrt{\frac{\prod_{i=1}^N N_i!}{N!}} \sum \hat{P} \varphi_{n_1}(\xi_1)\varphi_{n_2}(\xi_2)\cdots\varphi_{n_N}(\xi_N). \tag{12.30}$$

Pokazuje se da skup funkcija (12.30) sa svim kombinacijama jednočestičnih funkcija $\varphi_{n_i}$ čini ortonormirani bazis u prostoru stanja sistema od $N$ identičnih bozona $\mathcal{H}^{(s)}_{1\ldots N}$, koji je potprostor simetričnih funkcija prostora $\mathcal{H}_{1\ldots N}$.

**(ii) Fermioni**. Polazeći opet od nesimetrizovane funkcije (12.21) i koristeći sada formulu (12.17), sledi da su svojstvene funkcije hamiltonijana sistema od $N$ neinteragujućih identičnih fermiona predstavljene antisimetričnim funkcijama oblika

$$\psi_{\mathrm{a}} = C_{\mathrm{a}} \sum (-1)^{\nu(\hat{P})} \hat{P} \varphi_{n_1}(\xi_1)\varphi_{n_2}(\xi_2)\cdots\varphi_{n_N}(\xi_N). \tag{12.31}$$

U nastavku ćemo videti da se u slučaju fermiona u bilo kom jednočestičnom stanju $\varphi_{n_i}(\xi_i)$ može naći samo jedna čestica. Tada je

$$|\psi_{\mathrm{a}}|^2 = |C_{\mathrm{a}}|^2 N!, \tag{12.32}$$

pa, ako je talasna funkcija $\psi_{\mathrm{a}}$ normirana na jedinicu, sledi da je $|C_{\mathrm{a}}| = 1/\sqrt{N!}$, tj.

$$\psi_{\mathrm{a}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum (-1)^{\nu(\hat{P})} \hat{P} \varphi_{n_1}(\xi_1)\varphi_{n_2}(\xi_2)\cdots\varphi_{n_N}(\xi_N). \tag{12.33}$$

Ovaj izraz se može napisati u obliku *Slejterove determinante* (John Clarke Slater)

$$\psi_{\mathrm{a}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{n_1}(\xi_1) & \varphi_{n_1}(\xi_2) & \cdots & \varphi_{n_1}(\xi_N) \\ \varphi_{n_2}(\xi_1) & \varphi_{n_2}(\xi_2) & \cdots & \varphi_{n_2}(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varphi_{n_N}(\xi_1) & \varphi_{n_N}(\xi_2) & \cdots & \varphi_{n_N}(\xi_N) \end{vmatrix}. \tag{12.34}$$

Skup Slejterovih determinanti (12.34) sa svim kombinacijama jednočestičnih funkcija $\varphi_{n_i}$ čini ortonormirani bazis u prostoru stanja sistema od $N$ identičnih fermiona $\mathcal{H}^{(\mathrm{a})}_{1\ldots N}$, koji je potprostor antisimetričnih funkcija prostora $\mathcal{H}_{1\ldots N}$.

Podsetimo se da je determinanta uvek jednaka nuli ukoliko su joj bilo koje dve vrste ili kolone međusobno jednake. Primenjujući ovu osobinu, dolazimo do zaključka da, ukoliko je $n_i = n_j$ za bilo koje $i \neq j$, imaćemo da su $i$-ta i $j$-ta kolona Slejterove determinate iste i determinanta će biti jednaka nuli, tj. biće $\psi_{\mathrm{a}} = 0$. Prema tome, u sistemu koji se sastoji od identičnih fermiona dve ili više čestica ne mogu se nalaziti u istom jednočestičnom kvantnom stanju. Ova osobina sistema identičnih fermiona poznata je kao *Paulijev princip*.

### 12.2.4 Konstrukcija funkcija stacionarnih stanja sistema interagujućih identičnih čestica

Uzimajući u obzir interakciju među česticama, hamiltonijan sistema od $N$ identičnih čestica može se napisati u obliku

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \tag{12.35}$$

gde operator $\hat{V}$ predstavlja sumu članova koji opisuju interakciju svakog para čestica. U odeljku 12.1.3 naveli smo da je operator ukupne potencijalne energije koja uključuje interakciju svih čestica sistema sa spoljašnjom silom i međusobnu interakciju svakog para čestica simetričan operator i da isto važi za hamiltonijan sistema. Prema tome, hamiltonijan (12.35) komutira sa svim operatorima izmene čestica (izraz (12.15)), pa njegove svojstvene funkcije, kao i svojstvene funkcije hamiltonijana $\hat{H}_0$, moraju imati određenu simetriju u odnosu na izmenu bilo koje dve čestice. Dakle, moraju biti ili simetrične ili antisimetrične.

Postavlja se pitanje kako se konstruišu simetrične i antisimetrične svojstvene funkcije hamiltonijana $\hat{H}$ koji uključuje interakciju među česticama. Ako prvo odredimo svojstvene funkcije ovog hamiltonijana koje nemaju određenu simetriju, možemo ih naknadno simetrizovati koristeći formulu (12.16), odnosno (12.17). Nesimetrizovane funkcije se, na primer, mogu odrediti pomoću razvoja u red po funkcijama (12.21), koje čine svojstveni bazis hamiltonijana $\hat{H}_0$ u prostoru $\mathcal{H}_{1...N}$, pri čemi se koeficijenti razvoja dobijaju dijagonalizacijom matrice koja reprezentuje hamiltonijan $\hat{H}$ u tom bazisu. Alternativno, simetrične i antisimetrične svojstvene funkcije hamiltonijana $\hat{H}$ mogu se direktno računati koristeći razvoj po funkcijama (12.30), odnosno funkcijama (12.33), koje čine odgovarajući bazis u prostoru simetričnih funkcija $\mathcal{H}^{(s)}_{1...N}$, odnosno prostoru antisimetričnih funkcija $\mathcal{H}^{(a)}_{1...N}$.

U nerelativističkoj kvantnoj mehanici i u odsustvu magnetnog polja hamiltonijan sistema identičnih čestica ne zavisi od spina. Tada se talasne funkcije koje opisuju svojstvena stanja tog hamiltonijana mogu napisati u obliku proizvoda orbitne funkcije $\Phi$, koja zavisi samo od koordinata čestica, i spinske funkcije $\chi$, koja zavisi samo od spinskih promenljivih, dakle

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)\chi(s_{z1}, s_{z2}, \ldots, s_{zN}). \tag{12.36}$$

U tom slučaju orbitne i spinske funkcije moraju pojedinačno imati određeni tip simetrije u odnosu na izmenu čestica. Za sistem identičnih fermiona, s obzirom na to da im je ukupna talasna funkcija uvek antisimetrična, funkcije $\Phi$ i $\chi$ moraju biti suprotne simetrije, tj. $\psi_a = \Phi_a\chi_s$ ili $\Phi_s\chi_a$. Suprotno tome, za sistem identičnih bozona, pošto je ukupna talasna funkcija uvek simetrična, funkcije $\Phi$ i $\chi$ moraju biti iste simetrije, tj. $\psi_s = \Phi_s\chi_s$ ili $\Phi_a\chi_a$.

## 12.3 Višeelektronski sistemi

Ispitivanje osobina višeelektronskih sistema od suštinskog je značaja za oblasti fizike koje se bave proučavanjem strukture materije kao što su fizika atoma i molekula, hemijska fizika, fizika čvrstog stanja, fizika nanostruktura itd. Pošto su elektroni fermioni, stanja ovih sistema opisuju se antisimetričnim ukupnim talasnim funkcijama, kako u modelu neinteragujućih čestica, tako i u modelima koji uključuju međuelektronsku interakciju. U poslednjem slučaju stanja i energije mogu se računati direktno dijagonalizacijom matrice koja reprezentuje hamiltonijan sistema u bazisu Slejterovih determinanti ili koristeći neki od približnih metoda. U nastavku ćemo pokazati kako se koristeći perturbacioni metod određuju energije stacionarnih stanja dvoelektronskog sistema, a zatim ćemo opisati metod samousaglašenog polja, koji spada u varijacione metode i omogućava određivanje stanja i energija višeelektronskih sistema.

### 12.3.1 Sistem od dva elektrona. Interakcija izmene

Zanemarujući spin-orbitnu interakciju i druge interakcije koje nisu elektrostatičkog tipa, hamiltonijan dvoelektronskog sistema može se predstaviti u obliku

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{V}_{12}, \tag{12.37}$$

gde su $\hat{H}_i$ jednoelektronski hamiltonijani ($i = 1, 2$), a operator $\hat{V}$ opisuje Kulonovu interakciju među elektronima. Tipičan primer dvoelektronskog sistema jeste atom helijuma. U tom slučaju jednoelektronski hamiltonijani imaju oblik $\hat{H}_i = \hat{\mathbf{p}}_i^2/(2m_\mathrm{e}) - 2e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_i)$, a operator potencijalne energije koja se odnosi na međuelektronsku interakciju glasi $\hat{V}_{12} = e^2/(4\pi\varepsilon_0|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$.

Pošto hamiltonijan (12.37) ne zavisi od spina, ukupne talasne funkcije koje opisuju svojstvena stanja tog hamiltonijana mogu se napisati u obliku proizvoda orbitne i spinske funkcije

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi(s_{z1}, s_{z2}), \tag{12.38}$$

pri čemu, pošto se radi o fermionima, te funkcije moraju biti suprotne simetrije. Kao što smo videli u odeljku 11.4.5, spinsko stanje dvoelektronskog sistema sa određenim vrednostima kvadrata i projekcije ukupnog spina može biti singletno ($S = 0$) i tripletno ($S = 1$). Ako je spinsko stanje singletno, spinska funkcija $\chi$ je antisimetrična, pa orbitna funkcija $\Phi$ mora biti simetrična. Ako je, međutim, spinsko stanje neko od tripletnih stanja, spinska funkcija $\chi$ je simetrična, a orbitna funkcija $\Phi$ mora biti antisimetrična.

Za računanje svojstvenih energija hamiltonijana (12.37), koristeći perturbacioni metod prvog reda, potrebno je odrediti simetrične i antisimetrične orbitne funkcije koje opisuju svojstvena stanja dvoelektronskog hamiltonijana u modelu neinteragujućih elektrona ($\hat{V}_{12} = 0$). Ove funkcije se dobijaju simetrizacijom proizvoda jednoelektronskih orbitnih funkcija $\varphi_{k_1}(\mathbf{r}_1)$ i $\varphi_{k_2}(\mathbf{r}_2)$, koje su svojstvene funkcije odgovarajućih jednoelektronskih hamiltonijana. U slučaju dvoelektronskog atoma kao što je atom helijuma jednoelektronske funkcije su funkcije vodonikovog tipa (5.121), gde indeksi $k_1$ i $k_2$ predstavljaju skupove kvantnih brojeva $\{n_1, l_1, m_{l1}\}$ i $\{n_2, l_2, m_{l2}\}$. Ako je $k_1 \neq k_2$, tražene dvoelektronske orbitne funkcije imaju oblik

$$\Phi^{(0)}_{\mathrm{s,a}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\varphi_{k_2}(\mathbf{r}_2) \pm \varphi_{k_1}(\mathbf{r}_2)\varphi_{k_2}(\mathbf{r}_1)\right] \equiv \Phi_\pm(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \tag{12.39}$$

U slučaju $k_1 = k_2 \equiv k$, međutim, imamo da je $\Phi^{(0)}_\mathrm{a} = 0$, pa je tada moguća samo simetrična orbitna funkcija $\Phi^{(0)}_\mathrm{s} = \varphi_k(\mathbf{r}_1)\,\varphi_k(\mathbf{r}_2)$, koja stoji uz singletno spinsko stanje.

U aproksimaciji neinteragujućih elektrona energija dvoelektronskog sistema koja odgovara stanjima opisanim funkcijama $\Phi^{(0)}_{\mathrm{s,a}}$ iznosi $E^{(0)} = \varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_2}$. (Za dvoelektronski atom je $E^{(0)} = E_{n_1} + E_{n_2}$, gde su jednoelektronske energije $E_{n_i}$ date izrazom (5.101).) Popravka na ovu energiju u okviru teorije perturbacija prvog reda računa se kao srednja vrednost perturbacije $\hat{V}_{12}$ u neperturbovanom stanju $\psi^{(0)} = \Phi^{(0)}\chi$, tj.

$$\Delta E = \langle\psi^{(0)}|\hat{V}_{12}|\psi^{(0)}\rangle = \langle\Phi^{(0)}|\hat{V}_{12}|\Phi^{(0)}\rangle\langle\chi|\chi\rangle = \langle\Phi^{(0)}|\hat{V}_{12}|\Phi^{(0)}\rangle. \tag{12.40}$$

Ako poslednji izraz napišemo u obliku

$$\Delta E = \iint \mathrm{d}^3\mathbf{r}_1\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}_2\,\Phi^{(0)*}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)V_{12}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\Phi^{(0)}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \tag{12.41}$$

i u njega zamenimo funkcije $\Phi_\pm$ date izrazom (12.39), popravka na energiju $E^{(0)}$ u slučaju $k_1 \neq k_2$ može se predstaviti u obliku

$$\Delta E_\pm = C \pm J, \tag{12.42}$$

gde je

$$C = \iint \mathrm{d}^3\mathbf{r}_1\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}_2\,\varphi^*_{k_1}(\mathbf{r}_1)\varphi^*_{k_2}(\mathbf{r}_2)V_{12}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\varphi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\varphi_{k_2}(\mathbf{r}_2) \tag{12.43}$$

kulonski integral (srednja vrednost Kulonove energije $V_{12}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$), a

$$J = \iint \mathrm{d}^3\mathbf{r}_1\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}_2\,\varphi^*_{k_1}(\mathbf{r}_1)\varphi^*_{k_2}(\mathbf{r}_2)V_{12}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\varphi_{k_1}(\mathbf{r}_2)\varphi_{k_2}(\mathbf{r}_1) \tag{12.44}$$

integral izmene (koji, u poređenju sa kulonskim integralom, izgleda kao da su elektroni u njemu nakon interakcije zamenili mesta). Prisustvo ovog člana u izrazu (12.42) čisto je kvantnomehanički efekat, koji je posledica simetrizacije talasne funkcije. Uočimo da se popravka $\Delta E_+$ dobija u slučaju orbitnog stanja $\Phi_+$, koje ide uz singletno spinsko stanje, a popravka $\Delta E_-$ u slučaju orbitnog stanja $\Phi_-$, koje ide uz tripletno spinsko stanje. Dakle, iako hamiltonijan (12.37) ne zavisi od spina, energija sistema za date vrednosti kvantnih brojeva $k_1$, $k_2$ različita je za singletno i tripletno stanje

$$E^{(\mathrm{S})} = E^{(0)} + \Delta E_+ = E^{(0)} + C + J, \tag{12.45}$$

$$E^{(\mathrm{T})} = E^{(0)} + \Delta E_- = E^{(0)} + C - J. \tag{12.46}$$

Razlog je različita simetrija orbitne funkcije, koja je uslovljena simetrijom spinske funkcije. U slučaju dvoelektronskih atoma je $J > 0$, pa je za date vrednosti kvantnih brojeva $\{n_1, l_1, m_{l1}\}$ i $\{n_2, l_2, m_{l2}\}$ energija tripletnog stanja manja od energije singletnog stanja. Ovo je specijalni slučaj *Hundovog pravila* (Friedrich Hund), prema kome je energija elektronske konfiguracije atoma sa većim spinom niža.

Energije izmene $\pm J$ mogu se formalno posmatrati kao svojstvene vrednosti Hajzenbergovog operatora interakcije izmene[1]

$$\hat{V}_{\mathrm{ex}} = -\frac{1}{2}J\left(1 + \frac{4}{\hbar^2}\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}}_2\right). \tag{12.47}$$

Naime, proizvod spinova $\hat{\mathbf{s}}_1$ i $\hat{\mathbf{s}}_2$ može se napisati u obliku $\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}}_2 = (\hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{\mathbf{s}}_1^2 - \hat{\mathbf{s}}_1^2)/2$, a svojstvene vrednosti ovog operatora su

$$\frac{\hbar^2}{2}[S(S+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1)] = \frac{\hbar^2}{2}S(S+1) - \frac{3\hbar^2}{4} = \begin{cases} -\frac{3}{4}\hbar^2 \text{ za } S = 0, \\ \frac{1}{4}\hbar^2 \text{ za } S = 1. \end{cases} \tag{12.48}$$

Prema tome, svojstvene vrednosti operatora $\hat{V}_{\mathrm{ex}}$ za $S = 0, 1$ su $J$, odnosno $-J$.

[1] Na primeni ovog izraza zasniva se npr. Hajzenbergov model za feromagnete sa lokalizovanim magnetnim momentima. Videti „Uvod u fiziku čvrstog stanja” Č. Kitela (C. Kittel, Savremena administracija, 1970) ili „Teoriju magnetizma” D. Matisa (D. Mattis, *Theory of Magnetism I (II)*, Springer, 1981 (1985)).

### 12.3.2 Hartri-Fokov metod samousaglašenog polja

Za izračunavanje stanja i energija sistema sa većim brojem elektrona varijacioni prilaz se pokazao pogodnijim od perturbacionog, posebno za računanje osnovnog stanja atoma. Ovde ćemo opisati metod tzv. samousaglašenog polja, gde se do rešenja vremenski nezavisne Šredingerove jednačine dolazi iterativnim putem.

Zanemarujući spin-orbitnu interakciju, hamiltonijan sistema od $N$ elektrona može se predstaviti u obliku

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{1,N}{}' \hat{V}_{ij}, \tag{12.49}$$

gde su $\hat{H}_i$, $i = 1, \ldots, N$ hamiltonijani pojedinačnih elektrona u polju jezgra, a $\hat{V}_{ij}$ operatori potencijalne energije koja se odnosi na interakciju $i$-tog i $j$-tog elektrona ($i \neq j$). Simbol „$'$" znači da se u sumiranju po indeksima $i$ i $j$ ne uzimaju članovi $V_{ij}$ sa $i = j$, a suma se deli sa dva pošto članovi $V_{ij}$ i $V_{ji}$ opisuju interakciju istog para elektrona.

Talasna funkcija osnovnog stanja $\psi$ ovog sistema određuje se iz uslova da varijacija funkcionala $E[\psi] = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$ u odnosu na sve varijacije funkcije $\psi$ bude jednaka nuli uz uslov $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ (v. odeljak 10.4.1). Tačnost varijacionog metoda zavisi od izbora probne funkcije. Najjednostavniji izbor je funkcija u obliku proizvoda jednoelektronskih funkcija

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) = \varphi_1(\mathbf{r}_1)\varphi_2(\mathbf{r}_2)\cdots\varphi_N(\mathbf{r}_N). \tag{12.50}$$

Napomenimo da ova funkcija ne zadovoljava uslove simetrije sistema od $N$ identičnih čestica, o čemu ćemo diskutovati kasnije. Pošto $\hat{H}_i$ deluje samo na koordinate $i$-tog elektrona, a $\hat{V}_{ij}$ na koordinate $i$-tog i $j$-tog elektrona, imamo

$$E[\psi] = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_i \langle\psi|\hat{H}_i|\psi\rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j}{}' \langle\psi|\hat{V}_{ij}|\psi\rangle, \tag{12.51}$$

gde su

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{H}_i|\psi\rangle &= \int\cdots\int \mathrm{d}^3\mathbf{r}_1\cdots\mathrm{d}^3\mathbf{r}_N\, |\varphi_1(\mathbf{r}_1)|^2\cdots|\varphi_N(\mathbf{r}_N)|^2 \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}_i\, \varphi_i^*(\mathbf{r}_i)\,\hat{H}_i\,\varphi_i(\mathbf{r}_i) \\ &= \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}_i\, \varphi_i^*(\mathbf{r}_i)\,\hat{H}_i\,\varphi_i(\mathbf{r}_i) \end{aligned} \tag{12.52}$$

i slično

$$\langle\psi|\hat{V}_{ij}|\psi\rangle = \int\int \mathrm{d}^3\mathbf{r}_i\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}_j\, \varphi_i^*(\mathbf{r}_i)\,\varphi_j^*(\mathbf{r}_j)\,\hat{V}_{ij}\,\varphi_i(\mathbf{r}_i)\,\varphi_j(\mathbf{r}_j). \tag{12.53}$$

Prema tome

$$E[\psi] = \sum_i \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}_i\, \varphi_i^*\hat{H}_i\varphi_i + \frac{1}{2} \sum_{ij}{}' \int\int \mathrm{d}^3\mathbf{r}_i\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}_j\, \varphi_i^*\varphi_j^*\hat{V}_{ij}\varphi_i\varphi_j. \tag{12.54}$$

Uslovi $\delta E[\psi] = 0$ i $\int \varphi_i^* \varphi_i \, \mathrm{d}^3\mathbf{r}_i = 1$ daju

$$\sum_i \int \delta\varphi_i^* \Big[\hat{H}_i + \sum_{j(\neq i)} \int \varphi_j^* \hat{V}_{ij} \varphi_j \, \mathrm{d}^3\mathbf{r}_j\Big] \varphi_i \, \mathrm{d}^3\mathbf{r}_i = 0, \tag{12.55}$$

$$\int \delta\varphi_i^* \varphi_i \, \mathrm{d}^3\mathbf{r}_i = 0. \tag{12.56}$$

Množenjem poslednje jednačine Lagranževim množiteljem $\varepsilon_i$, a zatim oduzimanjem tog izraza od prethodne jednačine, dobijamo

$$\sum_i \int \delta\varphi_i^* \Big[\hat{H}_i + \sum_{j(\neq i)} \int \varphi_j^* \hat{V}_{ij} \varphi_j \, \mathrm{d}^3\mathbf{r}_j - \varepsilon_i\Big] \varphi_i \, \mathrm{d}^3\mathbf{r}_i = 0. \tag{12.57}$$

Ova suma jednaka je nuli samo ako su svi koeficijenti uz $\delta\varphi_i^*$ jednaki nuli, dakle

$$\Big[\hat{H}_i + \sum_{j(\neq i)} \int \varphi_j^* \hat{V}_{ij} \varphi_j \, \mathrm{d}^3\mathbf{r}_j - \varepsilon_i\Big] \varphi_i = 0, \quad i = 1, \ldots, N. \tag{12.58}$$

Sistem od $N$ integro-diferencijalnih jednačina (12.58) sa funkcijama $\varphi_i$ kao nepoznatim prvi je dobio Hartri (Douglas Hartree), a nezavisno od njega i Fok.

Hartri je predložio iterativni način rešavanja sistema jednačina (12.58). Srednja vrednost energije interakcije $i$-tog elektrona sa ostalih $N-1$ elektrona u *nultoj* aproksimaciji (tj. sa tim elektronima u vodoničnim stanjima $\varphi_i^{(0)}(\mathbf{r}_i)$) je

$$v_i^{(0)}(\mathbf{r}_i) = \sum_{j(\neq i)} \int \varphi_j^{(0)*} \hat{V}_{ij} \varphi_j^{(0)} \, \mathrm{d}^3\mathbf{r}_j. \tag{12.59}$$

Ako sada izraz $\sum_{j(\neq i)} \int \varphi_j^* \hat{V}_{ij} \varphi_j \, \mathrm{d}^3\mathbf{r}_j$ u jednačinama (12.58) zamenimo izrazom $v_i^{(0)}$, dobijamo sistem jednačina za $\varphi_i$ u *prvoj* aproksimaciji

$$[\hat{H}_i + v_i^{(0)} - \varepsilon_i] \varphi_i^{(1)} = 0, \quad i = 1, \ldots, N. \tag{12.60}$$

Rešavanjem ovog sistema dobijaju se funkcije $\varphi_i^{(1)}(\mathbf{r}_i)$, pomoću kojih se zatim računa srednja vrednost energije interakcije u prvoj aproksimaciji

$$v_i^{(1)}(\mathbf{r}_i) = \sum_{j(\neq i)} \int \varphi_j^{(1)*} \hat{V}_{ij} \varphi_j^{(1)} \, \mathrm{d}^3\mathbf{r}_j \tag{12.61}$$

i jednačina za funkcije $\varphi_i$ u *drugoj* aproksimaciji

$$[\hat{H}_i + v_i^{(1)} - \varepsilon_i] \varphi_i^{(2)} = 0, \quad i = 1, \ldots, N. \tag{12.62}$$

Iteracioni proces se ponavlja dok se ne dobije usrednjeni potencijal

$$v_i(\mathbf{r}_i) = \sum_{j(\neq i)} \int \varphi_j^* \hat{V}_{ij} \varphi_j \, \mathrm{d}^3\mathbf{r}_j, \tag{12.63}$$

za koji rešenja $\varphi_i$ sistema jednačina $[\hat{H}_i + v_i - \varepsilon_i]\varphi_i = 0$ daju isti taj usrednjeni potencijal $v_i$ do na zadatu grešku, tzv. Hartrijevo *samousaglašeno polje*.

Kao što vidimo, osnovna ideja Hartri-Fokovog metoda jeste svođenje višeelektronskog problema na problem jednog elektrona koji se kreće u srednjem polju jezgra i ostalih $N-1$ elektrona. Do srednjeg polja dolazi se iterativno polazeći od nulte aproksimacije za stanje ukupnog sistema, dato kao proizvod jednoelektronskih funkcija. Tačnu talasnu funkciju atoma, međutim, nije moguće predstaviti u obliku proizvoda (12.50), pri čemu nedostatak simetrije nije jedini razlog. Metod samousaglašenog polja, prema tome, ne uzima u obzir kompletnu interakciju između elektrona, već samo njen dominantni deo.

Pri računanju stanja višeelektronskih atoma obično se vrši usrednjavanje samousaglašenog polja po pravcima radijus vektora $\mathbf{r}_i$, čime se dobija usrednjeni potencijal koji je centralnosimetričan. To je tzv. aproksimacija centralnog polja koja omogućava da se rešenja za jednoelektronske funkcije $\varphi_i(\mathbf{r}_i)$ traže u obliku proizvoda sfernih harmonika i funkcija koje zavise samo od odgovarajuće radijalne promenljive $r_i$. Pošto te funkcije zadovoljavaju radijalnu jednačinu koja ima analogan oblik kao za atom vodonika, ali sa centralnosimetričnim potencijalom koji se razlikuje od Kulonovog, one se razlikuju od radijalnih funkcija za atom vodonika, ali imaju sličnu nodalnu strukturu. Iz tog razloga se u aproksimaciji centralnog polja pojavljuju isti kvantni brojevi kao za vodonične funkcije ($n_i$, $l_i$, $m_{li}$). Elektroni se onda raspoređuju po stanjima uz poštovanje Paulijevog principa, što ima za posledicu strukturu elektronskog omotača sa ljuskama i podljuskama[2].

Fok je metod samousaglašenog polja unapredio uvodeći antisimetrizovanu probnu funkciju u obliku Slejterove determinante sa jednoelektronskim stanjima, kod kojih je uzet u obzir i orbitni i spinski deo. Na taj način je u srednje polje uključena i interakcija izmene. Međutim, ako zanemarimo spin-orbitnu interakciju, probna funkcija se može napisati u obliku proizvoda orbitne i spinske funkcije, pri čemu simetrija orbitnog dela talasne funkcije zavisi od ukupnog spina sistema. Stanja sa različitim vrednostima ukupnog spina sistema u tom slučaju odgovaraće različitim samousaglašenim poljima[3]. Pomenimo na kraju da, iako Slejterova determinanta ispravno reprezentuje identičnu prirodu elektrona, to nije najopštiji oblik probne funkcije koji se može koristiti u varijacionom metodu.

[2] Aproksimacija centralnog polja opisana je u knjizi „Fizika atoma i molekula” N. Simonovića (Prirodno-matematički fakultet Univerzitet u Banjoj Luci, 2024), a više detalja može se naći u knjizi „Fizika atoma i molekula” Bransdena i Žoašena (B. H. Bransden, C. J. Joachain, *Physics of atoms and molecules*, Longman Scientific & Technical, 1990).

[3] Fokov metod predstavljen je u knjizi „Kvantna mehanika” Davidova (bibl. ref. I.4) na primeru dvoelektronskog sistema za koji su izvedene zasebne jednačine samousaglašenog polja za singletna i tripletna stanja sistema.

# 13 Teorija prelaza pod uticajem vremenski zavisnih perturbacija

U dosadašnjem predstavljanju formalizma i metoda kvantne mehanike uglavnom smo se bavili konzervativnim sistemima čiji hamiltonijan ne zavisi eksplicitno od vremena (dakle, nije funkcija vremena u Šredingerovoj slici). Videli smo da se Šredingerova jednačina za izvestan broj jednostavnih sistema može rešiti egzaktno (analitički), dok za realistične sisteme to uglavnom nije izvodljivo, pa se za rešavanje koriste približni ili numerički metodi. Ovde se pokazalo kao povoljna okolnost to što se ukupni hamiltonijan $\hat{H}$ često može napisati u obliku zbira neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$, koji opisuje osnovnu strukturu sistema i čiji je svojstveni problem moguće rešiti egzaktno ili numerički, i operatora $\hat{V}$ dodatne interakcije koju zovemo perturbacijom (izraz (9.94)). Ako perturbacija ne zavisi od vremena (izraz 10.2), za približno nalaženje rešenja vremenski nezavisne Šredingerove jednačine može se koristiti teorija stacionarnih perturbacija koja je opisana u glavi 10.

U ovoj glavi ćemo pokazati kako se rešenja pune (vremenski zavisne) Šredingerove jednačine mogu odrediti kada perturbacija zavisi od vremena. Glavni motiv za to je činjenica, koju smo već pominjali u odeljku 9.3.7, da dodatna interakcija u odnosu na osnovnu strukturu kvantnog sistema predstavlja generator koji uzrokuje prelaze među svojstvenim stanjima hamiltonijana osnovne strukture $\hat{H}_0$. Pri tome, tipična situacija je da se perturbacija u nekom trenutku „uključuje” i nakon određenog vremena „isključuje”, pri čemu operator $\hat{V}$ za vreme trajanja interakcije može i ne mora da zavisi od vremena. Tada, ako je stanje sistema pre uključenja interakcije bilo neko od svojstvenih stanja hamiltonijana $\hat{H}_0$, ono po uključenju interakcije netrivijalno evoluira, te se nakon njenog isključenja i izvršenog merenja energije sistem može naći u bilo kom od svojstvenih stanja tog hamiltonijana. Primarni cilj u analizi ovog procesa jeste izračunavanje verovatnoće prelaza iz početnog stanja sistema (pre uključenja interakcije) u njegovo krajnje stanje (nakon isključenja interakcije i izvršenog merenja).

Svakako najvažnija primena teorije prelaza pod uticajem vremenski zavisnih perturbacija je u proučavanju interakcije kvantnih sistema (atoma, molekula itd.) sa elektromagnetnim poljem, koja dovodi do prelaza uz apsorpciju ili emisiju fotona. U slučaju slabijih polja teorija vremenski zavisnih perturbacija, koja će biti opisana u nastavku, uglavnom daje zadovoljavajući opis. Razmotrićemo, međutim, i primer gde perturbativni prilaz nije adekvatan, na kome ćemo predstaviti alternativni način rešavanja koristeći tzv. aproksimaciju rotirajućih talasa. Teorija ima svoju primenu i kod prelaza gde operator $\hat{V}$ ne zavisi eksplicitno od vremena kao što su neradijativni prelazi u atomima, npr. Ožeov efekat (Pierre Victor Auger) i autojonizacija atoma.

# 13.1 Metod vremenski zavisnih koeficijenata

## 13.1.1 Jednačine za koeficijente

Pretpostavimo da u intervalu $0 \leq t \leq \tau$ na sistem opisan hamiltonijanom $\hat{H}_0$ koji ne zavisi od vremena deluje perturbacija koja eksplicitno zavisi od vremena i opisana je operatorom $\hat{V}(t)$. Interagujući sistem tada je opisan hamiltonijanom

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t), \tag{13.1}$$

gde operator

$$\hat{H}'(t) = \begin{cases} \hat{V}(t), & \text{za } 0 \leq t \leq \tau, \\ 0, & \text{za } t < 0 \text{ ili } t > \tau \end{cases} \tag{13.2}$$

opisuje interakciju koja se uključuje u trenutku $t = 0$ i isključuje u trenutku $t = \tau$. Pošto hamiltonijan $\hat{H}$ eksplicitno zavisi od vremena u intervalu $0 \leq t \leq \tau$, sistem se tada ne može nalaziti u stacionarnom stanju. Proizvoljno stanje sistema, međutim, može se u svakom trenutku razviti po nekom bazisu, uključujući i svojstveni bazis neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$.

Neka su $\varphi_n$ svojstvene funkcije (ili svojstveni vektori), a $E_n$ odgovarajuće svojstvene energije neperturbovanog hamiltonijana, dakle rešenja svojstvenog problema

$$\hat{H}_0 \varphi_n = E_n \varphi_n. \tag{13.3}$$

Stacionarna rešenja odgovarajuće vremenski zavisne Šredingerove jednačine

$$i\hbar \frac{\partial \psi^{(0)}}{\partial t} = \hat{H}_0 \psi^{(0)} \tag{13.4}$$

tada su $\varphi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$, a opšte rešenje se može predstaviti u obliku njihove superpozicije

$$\psi^{(0)} = \sum_n c_n^{(0)} \varphi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}, \tag{13.5}$$

gde su $c_n^{(0)}$ proizvoljne konstante. S obzirom na to da se za $t < 0$ i $t > \tau$ hamiltonijan $\hat{H}$ svodi na $\hat{H}_0$, uz odgovarajući izbor konstanti ovo rešenje može da opiše stanja sistema pre uključenja i nakon isključenja interakcije.

Sledeći *Dirakov metod varijacije konstanti*, opšte rešenje vremenski zavisne Šredingerove jednačine za perturbovani sistem

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \tag{13.6}$$

potražićemo u obliku superpozicije stacionarnih stanja neperturbovanog hamiltonijana sa vremenski zavisnim koeficijentima

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t) \varphi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}. \tag{13.7}$$

Jednačine za koeficijente $c_n(t)$ nalaze se zamenjujući razvoj talasne funkcije (13.7) u Šredingerovu jednačinu (13.6). U prvom koraku imamo

$$i\hbar \sum_k \frac{\mathrm{d}c_k}{\mathrm{d}t} \varphi_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} + \sum_k c_k(t) E_k \varphi_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} = \sum_k c_k(t)\Big(\hat{H}_0 + \hat{V}(t)\Big)\varphi_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}. \quad (13.8)$$

Delujući operatorom $\hat{H}_0$ na funkcije $\varphi_k$ prema jednačini (13.3), na desnoj strani jednakosti (13.8) pojavljuje se suma $\sum_k c_k(t) E_k \varphi_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}$ koja postoji i na njenoj levoj strani. Skraćivanjem ovih suma i skalarnim množenjem dobijene jednačine funkcijom $\varphi_n$ sa leve strane, sledi

$$i\hbar \sum_k \frac{\mathrm{d}c_k}{\mathrm{d}t} \langle\varphi_n|\varphi_k\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} = \sum_k c_k(t)\langle\varphi_n|\hat{V}(t)|\varphi_k\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}. \quad (13.9)$$

Zahvaljujući ortonormiranosti svojstvenih funkcija neperturbovanog hamiltonijana ($\langle\varphi_n|\varphi_k\rangle = \delta_{nk}$), suma po $k$ na levoj strani jednačine svodi se na jedan ($n$-ti) član. Konačno, množenjem obe strane jednačine sa $e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}$ dobijamo

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}c_n}{\mathrm{d}t} = \sum_k c_k(t) V_{nk}(t) e^{i\omega_{nk} t}, \quad (13.10)$$

gde su $V_{nk}(t) = \langle\varphi_n|\hat{V}(t)|\varphi_k\rangle$ matrični elementi perturbacije, a $\omega_{nk} = (E_n - E_k)/\hbar$ tzv. *Borove frekvencije* ili *frekvencije prelaza*. Jednačine (13.10) za koeficijente $c_n(t)$ predstavljaju beskonačni sistem spregnutih diferencijalnih jednačina prvog reda koji je ekvivalentan Šredingerovoj jednačini (13.6).

S obzirom na to da perturbacija počinje da deluje od trenutka $t = 0$, poredeći razvoje (13.5) i (13.7), sledi da se vremenski zavisni koeficijenti $c_n(t)$ za $t \leq 0$ svode na konstante $c_n^{(0)}$. Prema tome, koeficijenti $c_n^{(0)}$ predstavljaju početne vrednosti za rešenja sistema jednačina (13.10), tj.

$$c_n(0) = c_n^{(0)}. \quad (13.11)$$

Shodno tome, funkcija (13.5) opisuje stanje sistema do trenutka $t = 0$, a njegova dalja evolucija određena je funkcijom (13.7).

### 13.1.2 Perturbativni prilaz. Iterativno rešenje za koeficijente

Ako uvedemo mali parametar $\lambda$ i izvršimo zamenu $\hat{V} \to \lambda\hat{V}$, jednačina za koeficijente (13.10) postaje

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}c_n}{\mathrm{d}t} = \lambda \sum_k c_k(t) V_{nk}(t) e^{i\omega_{nk} t} \quad (13.12)$$

i njeno rešenje možemo potražiti u obliku reda

$$c_n(t) = c_n^{(0)} + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \cdots. \quad (13.13)$$

Zamenjujući ovaj razvoj u jednačinu (13.12) i izjednačavajući članove istog reda po $\lambda$, dobijamo rekurentne relacije

$$
\begin{aligned}
i\hbar \frac{\mathrm{d}c_n^{(0)}}{\mathrm{d}t} &= 0, && (13.14)\\
i\hbar \frac{\mathrm{d}c_n^{(1)}}{\mathrm{d}t} &= \sum_k c_k^{(0)}(t)\, V_{nk}(t)\, e^{i\omega_{nk}t}, && (13.15)\\
&\ \vdots \\
i\hbar \frac{\mathrm{d}c_n^{(s)}}{\mathrm{d}t} &= \sum_k c_k^{(s-1)}(t)\, V_{nk}(t)\, e^{i\omega_{nk}t}. && (13.16)
\end{aligned}
$$

Prva jednačina potvrđuje da su koeficijenti $c_n^{(0)}$ vremenski nezavisni.

Pretpostavimo sada da se sistem u trenutku $t = 0$ nalazi u stacionarnom stanju $\varphi_m$, koje je jedno od svojstvenih stanja neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$. To se postiže ako se u tom (ili nekom ranijem) trenutku izvrši merenje energije neperturbovanog sistema i, pri tome, dobije vrednost $E_m$, što naravno zahteva da perturbacija do tog trenutka bude isključena. Ova pretpostavka je ekvivalentna početnim uslovima $c_m(0) = 1$ i $c_n(0) = 0$ za $n \neq m$, tj.

$$c_n(0) = \delta_{nm}. \tag{13.17}$$

Odatle i na osnovu relacija (13.11) i (13.13) sledi da je

$$c_n^{(0)} = \delta_{nm} \tag{13.18}$$

i

$$c_n^{(s)}(0) = 0, \quad s \geq 1. \tag{13.19}$$

Pošto su koeficijenti nultog reda $c_n^{(0)}$ konstante, uslov (13.18) važi u svakom trenutku, dok uslovi (13.19) važe za $t \leq 0$. Zamenjujući ovaj rezultat u rekurentnu relaciju (13.15) za $s = 1$, dobijamo

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}c_n^{(1)}}{\mathrm{d}t} = \sum_k \delta_{km} V_{nk}(t)\, e^{i\omega_{nk}t} = V_{nm}(t)\, e^{i\omega_{nm}t}, \tag{13.20}$$

odakle je

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \mathrm{d}t'\, V_{nm}(t')\, e^{i\omega_{nm}t'}. \tag{13.21}$$

Zamenjujući rešenje za $c_n^{(1)}$ u rekurentnu relaciju (13.16) za $s = 2$, dobijamo

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}c_n^{(2)}}{\mathrm{d}t} = \sum_k c_k^{(1)}(t) V_{nk}(t)\, e^{i\omega_{nk}t} = \sum_k \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \mathrm{d}t'\, V_{km}(t')\, e^{i\omega_{km}t'}\, V_{nk}(t)\, e^{i\omega_{nk}t}, \tag{13.22}$$

odakle je

$$c_n^{(2)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_k \int_0^t \mathrm{d}t_1\, V_{nk}(t_1)\, e^{i\omega_{nk}t_1} \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2\, V_{km}(t_2)\, e^{i\omega_{km}t_2}. \tag{13.23}$$

## 13.2 Prelazi pod uticajem vremenski zavisnih perturbacija

### 13.2.1 Verovatnoća prelaza u prvoj aproksimaciji

Ako se pre uključenja perturbacije $\hat{V}(t)$ sistem nalazio u stacionarnom stanju koje je neko svojstveno stanje neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$, njenim uključivanjem u trenutku $t = 0$ to isto stanje, s obzirom na to da nije svojstveno stanje ukupnog hamiltonijana $\hat{H}$, više neće biti stacionarno i počeće da evoluira. Ukoliko nakon nekog vremena izvršimo merenje energije neperturbovanog sistema, za šta je potrebno da se perturbacija opet isključi, postoji konačna verovatnoća da se sistem nađe u istom ili nekom drugom stacionarnom stanju.

Neka je u skladu sa izrazom (13.2) perturbacija isključena u trenutku $t = \tau > 0$. Koeficijenti $c_n(t)$, koji su u početnom trenutku ($t = 0$) imali vrednosti (13.11), a zatim se te vrednosti menjale do trenutka $t = \tau$, nakon toga ponovo postaju konstante, dakle

$$c_n(t) = c_n(\tau), \quad t \geq \tau. \tag{13.24}$$

Prema tome, stanje sistema koje je iz nekog svojstvenog stanja $\varphi_m$ neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$ evoluiralo u skladu sa promenom koeficijenata $c_n(t)$, za $t > \tau$ biće opisano talasnom funkcijom

$$\psi(t) = \sum_n c_n(\tau)\varphi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}. \tag{13.25}$$

Ako se tada izvrši merenje energije, sistem će iz ovog nestacionarnog stanja preći u neko od svojstvenih stanja $\varphi_n$ neperturbovanog hamiltonijana, pri čemu je verovatnoća prelaza na osnovu izraza (6.68)

$$\mathcal{P}_{nm} \equiv \mathcal{P}(\varphi_m \rightsquigarrow \psi(t) \to \varphi_n) = |\langle \varphi_n | \psi(t) \rangle|^2 = |c_n(\tau)|^2. \tag{13.26}$$

Odredićemo verovatnoću prelaza iz početnog stacionarnog stanja $\varphi_m$ (u kome se sistem nalazio u trenutku $t = 0$) u stacionarno stanje $\varphi_n \neq \varphi_m$ (u trenutku $t = \tau$) u okviru aproksimacije prvog reda. Tada je $c_n^{(0)} = 0$, pa imamo

$$c_n(\tau) \approx c_n^{(1)}(\tau) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\tau \mathrm{d}t V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t}, \tag{13.27}$$

odakle je

$$\mathcal{P}_{nm}(\tau) = |c_n(\tau)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau \mathrm{d}t V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t} \right|^2. \tag{13.28}$$

Ako je $\mathcal{P}_{nm} \neq 0$, za prelaz $\varphi_m \to \varphi_n$ kažemo da je dozvoljen (moguć). Suprotno tome, ako je $\mathcal{P}_{nm} = 0$, kažemo da je prelaz zabranjen. Ovaj rezultat u okviru teorije perturbacija prvog reda zavisi, pre svega, od vrednosti matričnog elementa perturbacije $V_{nm}$. Moguće je, međutim, da prelaz koji je zabranjen u prvoj aproksimaciji bude dozvoljen u aproksimaciji višeg reda, ali je u tom slučaju verovatnoća prelaza obično vrlo mala.

### 13.2.2 Verovatnoća prelaza pod uticajem konstantne perturbacije

Ukoliko perturbacija $\hat{V}$ ne zavisi od vremena, izraz (13.27) za popravku prvog reda glasi

$$c_n^{(1)}(\tau) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^\tau \mathrm{d}t\, V_{nm}\, e^{i\omega_{nm}t} = \frac{V_{nm}}{i\hbar}\int_0^\tau \mathrm{d}t\, e^{i\omega_{nm}t} = V_{nm}\frac{1-e^{i\omega_{nm}\tau}}{\hbar\omega_{nm}}, \tag{13.29}$$

odakle je verovatnoća prelaza $\varphi_m \to \varphi_n$ u aproksimaciji prvog reda

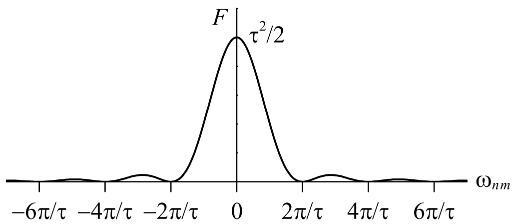
$$\mathcal{P}_{nm} = |c_n^{(1)}(\tau)|^2 = \frac{|V_{nm}|^2}{\hbar^2\omega_{nm}^2}\,|1-e^{i\omega_{nm}\tau}|^2 = 2\,\frac{|V_{nm}|^2}{\hbar^2\omega_{nm}^2}\,(1-\cos\omega_{nm}\tau). \tag{13.30}$$

Ova verovatnoća obično se piše u obliku

$$\mathcal{P}_{nm} = \frac{2}{\hbar^2}\,|V_{nm}|^2 F(E_n - E_m), \tag{13.31}$$

gde je

$$F(E_n - E_m) = F(\omega_{nm}) = \frac{1-\cos\omega_{nm}\tau}{\omega_{nm}^2}. \tag{13.32}$$




**Slika 13.1.** Funkcija $F(\omega_{nm})$.

Funkcija $F(\omega_{nm})$ je prikazana na slici 13.1. Ona je pozitivna parna funkcija koja ima glavni maksimum za $\omega_{nm} = 0$ (tj. za $E_n = E_m$). Vrednost funkcije u toj tački iznosi $F(0) = \tau^2/2$, što se dobija računanjem granične vrednosti

$$\begin{aligned}\lim_{\omega_{nm}\to 0} F(\omega_{nm}) &= \lim_{\omega_{nm}\to 0}\frac{1-\cos\omega_{nm}\tau}{\omega_{nm}^2} = \lim_{\omega_{nm}\to 0}\frac{\tau\sin\omega_{nm}\tau}{2\omega_{nm}} \\ &= \lim_{\omega_{nm}\to 0}\frac{\tau^2\cos\omega_{nm}\tau}{2} = \frac{\tau^2}{2}.\end{aligned} \tag{13.33}$$

Nule funkcije odgovaraju frekvencijama prelaza $\omega_{nm} = 2k\pi/\tau$, $k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ . Uočimo da, kada se vreme delovanja perturbacije $\tau$ povećava, amplituda brzo raste, a nule se zgušnjavaju, tako da funkcija $F$ u graničnom slučaju $\tau \to \infty$ prelazi u delta funkciju

$$\lim_{\tau\to\infty} F(E_n - E_m) = \pi\hbar\tau\delta(E_n - E_m). \tag{13.34}$$

Prema tome, za veliku vrednost $\tau$ verovatnoća prelaza postaje

$$\mathcal{P}_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{nm}|^2 \tau \delta(E_n - E_m). \tag{13.35}$$

U tom slučaju *verovatnoća prelaza u jedinici vremena* $W_{nm} = \mathrm{d}\mathcal{P}_{nm}/\mathrm{d}t$, tzv. „stopa" prelaza, glasi

$$W_{nm} = \frac{\mathcal{P}_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{nm}|^2 \delta(E_n - E_m). \tag{13.36}$$

Uočimo da $W_{nm} \to 0$ za $n \neq m$.

U praksi početno i krajnje stanje pripadaju neprekidnom ili kvazineprekidnom (tj. diskretnom sa velikom gustinom nivoa) delu spektra. Tada su pri merenju verovatnoće prelaza uključeni prelazi u sva stanja koja imaju blisku energiju i skoro jednake matrične elemente $V_{nm}$. U tom slučaju formulu za verovatnoću treba prosumirati po svim takvim krajnjim stanjima. Zbog (kvazi)neprekidnosti sumiranje prelazi u integraciju, pri čemu je potrebno poznavati gustinu stanja $\rho(E_n)$, tj. broj stanja date vrste po jedinici energije $E_n$. Dakle, stopa prelaza između stanja (kvazi)kontinuuma glasi

$$W_{nm}^{(\mathrm{con})} = \int W_{nm} \rho(E_n) \,\mathrm{d}E_n = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{nm}|^2 \rho(E_n). \tag{13.37}$$

Ova formula je poznata kao *Fermijevo zlatno pravilo* (iako je prvobitno izvedena od strane Diraka). Formula se uopštava i na slučaj periodične perturbacije.

### 13.2.3 Verovatnoća prelaza pod uticajem periodične perturbacije

Posmatrajmo sada slučaj vremenski zavisne perturbacije koja je periodična funkcija vremena okarakterisana ugaonom frekvencijom $\omega$

$$\hat{V}(t) = \hat{V}_0 \sin(\omega t) = \hat{v}_+ e^{i\omega t} + \hat{v}_- e^{-i\omega t}, \tag{13.38}$$

pri čemu je $\hat{V}_0$ vremenski nezavisan ermitski operator, dok su $\hat{v}_+ = \hat{V}_0/2i$ i $\hat{v}_- = (\hat{v}_+)^+ = -\hat{v}_+$. Ovaj izraz možemo napisati u obliku sume

$$\hat{V}(t) = \hat{V}_-(t) + \hat{V}_+(t), \tag{13.39}$$

gde su

$$\hat{V}_\pm(t) = \hat{v}_\pm e^{\pm i\omega t}. \tag{13.40}$$

Pretpostavimo opet da je sistem prvobitno u stacionarnom stanju $\varphi_m$ i posmatrajmo prelaze $\varphi_m \to \varphi_n$ pod uticajem operatora $\hat{V}_\pm(t)$ u aproksimaciji prvog reda. Izraz (13.27) za popravku prvog reda u ta dva slučaja glasi

$$c_n^{(1)}(\tau) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\tau \mathrm{d}t\, V_{nm}^{(\pm)} e^{i\omega_{nm} t} = \frac{v_{nm}^{(\pm)}}{i\hbar} \int_0^\tau \mathrm{d}t\, e^{i(\omega_{nm} \pm \omega)t} = v_{nm}^{(\pm)} \frac{1 - e^{i(\omega_{nm} \pm \omega)\tau}}{\hbar(\omega_{nm} \pm \omega)}, \tag{13.41}$$

gde su $v_{nm}^{(\pm)} = \langle \varphi_n | \hat{v}_\pm | \varphi_m \rangle$. Uočimo da se izraz (13.41) razlikuje od izraza (13.29), koji važi za konstantnu perturbaciju, po frekvencijama $\omega_{nm} \pm \omega$ koje se ovde pojavljuju umesto Borove frekvencije $\omega_{nm}$. Prema tome, odgovarajući izrazi za verovatnoće, odnosno gustine verovatnoća prelaza, mogu se dobiti direktno iz izraza (13.36) i (13.37) smenama $\omega_{nm} \to \omega_{nm} \pm \omega$ i $V_{nm} \to v_{nm}^{(\pm)}$. Na taj način dobija se

$$\mathcal{P}_{nm}^{\pm} = \frac{2\pi}{\hbar} |v_{nm}^{(\pm)}|^2 \tau \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega), \tag{13.42}$$

odnosno

$$W_{nm}^{\pm} = \frac{2\pi}{\hbar} |v_{nm}^{(\pm)}|^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega). \tag{13.43}$$

Napomenimo ovde da je na osnovu definicije (13.40) $|V_{nm}^{(\pm)}(t)|^2 = |v_{nm}^{(\pm)}|^2$.

Realističan primer periodične perturbacije je interakcija atoma sa elektromagnetnim poljem. Uočimo da su prelazi $\varphi_m \to \varphi_n$ pod uticajem operatora $\hat{V}_{\pm}(t)$ dozvoljeni ($\mathcal{P}_{nm}^{\pm} \neq 0$) ukoliko se energije početnog i krajnjeg stanja, $E_m$ i $E_n$, razlikuju za vrednost $\pm\hbar\omega$. Apsolutnu vrednost ove razlike pripisujemo energiji fotona elektromagnetnog polja. Pri tome, znak „+" odgovara smanjenju energije atoma ($E_n < E_m$), tj. *emisiji* fotona, dok znak „–" odgovara povećanju energije atoma ($E_n > E_m$) i *apsorpciji* fotona.

U ovom primeru atom (sistem I) i polje (sistem II) zajedno čine ukupan sistem čija se energija održava. Tako npr. u slučaju emisije fotona sistem I gubi energiju na račun povećanja energije sistema II. Stopa odgovarajućeg prelaza je

$$W_{nm}^{+} = \frac{2\pi}{\hbar} |v_{nm}^{(+)}|^2 \delta(E_\mathrm{f}^{+} - E_\mathrm{i}^{+}), \tag{13.44}$$

gde su $E_\mathrm{i}^{+} = E_m + E_0^{\mathrm{II}}$ i $E_\mathrm{f}^{+} = E_n + \hbar\omega + E_0^{\mathrm{II}}$ respektivno energije ukupnog sistema u početnom (i) i krajnjem (f) stanju, dok je $E_0^{\mathrm{II}}$ energija polja pre emisije fotona.

Ako posmatramo prelaze iz početnog stanja u različita krajnja stanja (kvazi)neprekidnog spekta koja imaju blisku energiju, formula za verovatnoću sumira se po svim takvim krajnjim stanjima celog sistema (I + II). Uvodeći gustinu stanja $\rho(E_\mathrm{f}^{+})$, u slučaju emisije fotona ($E_n = E_m - \hbar\omega$) imamo

$$W_{nm}^{+} = \frac{2\pi}{\hbar} |v_{nm}^{(+)}|^2 \rho(E_\mathrm{f}^{+}). \tag{13.45}$$

Analogno, u slučaju apsorpcije ($E_n = E_m + \hbar\omega$) dobijamo

$$W_{nm}^{-} = \frac{2\pi}{\hbar} |v_{nm}^{(-)}|^2 \rho(E_\mathrm{f}^{-}). \tag{13.46}$$

Ovi izrazi predstavljaju generalizacije zlatnog pravila (13.37) na slučajeve emisije i apsorpcije fotona.

### 13.2.4 Sistem sa dva nivoa pod uticajem periodične perturbacije. Rabijeve oscilacije

Razmotrimo sistem sa dva nivoa, $E_1$ i $E_2$, pri čemu je $E_1 < E_2$. Neka su nivoi nedegenerisani, a odgovarajuća stanja opisana funkcijama $\varphi_1$ i $\varphi_2$. Pretpostavimo da se u početnom trenutku $t = 0$ uključuje periodična perturbacija $\hat{V}(t)$ koja deluje na sistem. Stanje sistema u početnom trenutku može biti jedno od stanja $\varphi_1$ i $\varphi_2$ ili njihova linearna kombinacija sa proizvoljnim koeficijentima $c_1(0)$ i $c_2(0)$. Evolucija sistema dalje je opisana jednačinama za koeficijente (13.10), koje se ovde svode na sistem od dve spregnute diferencijalne jednačine prvog reda za koeficijente $c_1(t)$ i $c_2(t)$

$$i\hbar\dot{c}_1 = V_{11}(t)c_1(t) + V_{12}(t)e^{i\omega_{12}t}c_2(t), \tag{13.47}$$

$$i\hbar\dot{c}_2 = V_{21}(t)e^{i\omega_{21}t}c_1(t) + V_{22}(t)c_2(t). \tag{13.48}$$

Ako je perturbacija $\hat{V}(t)$ oblika (13.38), sistem jednačina postaje

$$i\hbar\dot{c}_1 = [v_{11}^{(+)}e^{i\omega t} + v_{11}^{(-)}e^{-i\omega t}]c_1(t) + [v_{12}^{(+)}e^{i\Delta\omega t} + v_{12}^{(-)}e^{-i(\omega+\omega_{21})t}]c_2(t), \tag{13.49}$$

$$i\hbar\dot{c}_2 = [v_{21}^{(+)}e^{i(\omega+\omega_{21})t} + v_{21}^{(-)}e^{-i\Delta\omega t}]c_1(t) + [v_{22}^{(+)}e^{i\omega t} + v_{22}^{(-)}e^{-i\omega t}]c_2(t), \tag{13.50}$$

gde je

$$\Delta\omega = \omega - \omega_{21} \tag{13.51}$$

„razdešenost” frekvencije periodične perturbacije u odnosu na frekvenciju prelaza.

Sistem jednačina (13.49), (13.50) nije moguće rešiti egzaktno, ali ukoliko je frekvencija $\omega$ bliska svojoj rezonantnoj vrednosti $\omega = \omega_{21}$, tj. ako je $|\Delta\omega| \ll \omega$, onda će članovi sa faznim faktorima $e^{\pm i\Delta\omega t}$ biti mnogo značajniji od onih sa $e^{\pm i(\omega+\omega_{21})t}$ i $e^{\pm i\omega t}$. Razlog je taj što poslednji članovi osciluju mnogo brže i u srednjem daju mali doprinos u jednačinama. Stoga je razumno brzo oscilujuće članove zanemariti. Ovo je poznato kao *aproksimacija rotirajućih talasa*, pošto jedini članovi koji se zadržavaju jesu oni u kojima su vremenske zavisnosti sistema i perturbacije u fazi. U ovoj aproksimaciji sistem jednačina (13.49), (13.50) svodi se na

$$i\hbar\dot{c}_1 = v_{12}^{(+)}e^{i\Delta\omega t}c_2(t), \tag{13.52}$$

$$i\hbar\dot{c}_2 = v_{21}^{(-)}e^{-i\Delta\omega t}c_1(t), \tag{13.53}$$

pri čemu je $v_{12}^{(+)} = V_{12}^{(0)}/(2i) = [-V_{21}^{(0)}/(2i)]^* = v_{21}^{(-)*}$, gde su $V_{nm}^{(0)} = \langle\varphi_n|\hat{V}_0|\varphi_m\rangle$.

Sistem jednačina (13.52), (13.53) se može rešiti egzaktno. Npr. diferenciranjem jednačine (13.52) po vremenu, a zatim eliminacijom koeficijenta $c_2$ i njegovog izvoda pomoću iste jednačine i jednačine (13.53), dobijamo diferencijalnu jednačinu drugog reda za koeficijent $c_1$

$$\ddot{c}_1^2 - i\Delta\omega\dot{c}_1 + \frac{\Omega_0^2}{4}c_1 = 0, \tag{13.54}$$

gde je

$$\Omega_0 = 2\frac{|v_{21}^{(\pm)}|}{\hbar} = \frac{|V_{21}^{(0)}|}{\hbar}. \tag{13.55}$$

Rešenje jednačine ćemo potražiti u obliku $c_1(t) = c_1(0)e^{i\alpha t}$. Tada je $\dot{c}_1 = i\alpha c_1$ i $\ddot{c}_1 = -\alpha^2 c_1$, pa zamenom ovih izraza u gornju jednačinu i deljenjem obe strane dobijene jednakosti sa $c_1$ dobijamo jednačinu za parametar $\alpha$

$$\alpha^2 - \Delta\omega\alpha - \frac{\Omega_0^2}{4} = 0. \tag{13.56}$$

Rešenja ove jednačine su

$$\alpha = \frac{1}{2}(\Delta\omega \pm \Omega_{\mathrm{R}}), \tag{13.57}$$

gde je

$$\Omega_{\mathrm{R}} = \sqrt{\Omega_0^2 + \Delta\omega^2} = \sqrt{\frac{|V_{21}^{(0)}|^2}{\hbar^2} + \Delta\omega^2} \tag{13.58}$$

tzv. *Rabijeva frekvencija* (Isidor Isaac Rabi). Sama veličina $\Omega_0$ poznata je kao rezonantna Rabijeva frekvencija. Partikularna rešenja jednačine (13.54), prema tome, glase $e^{i(\Delta\omega\pm\Omega_{\mathrm{R}})t/2}$, pa se opšte rešenje može napisati u obliku

$$c_1(t) = e^{i\Delta\omega t/2}\left(A\, e^{i\Omega_{\mathrm{R}}t/2} + B\, e^{-i\Omega_{\mathrm{R}}t/2}\right), \tag{13.59}$$

gde su $A$ i $B$ proizvoljne konstante. Koeficijent $c_2(t)$ dobija se diferenciranjem ovog izraza po vremenu i zamenom u jednačinu (13.52)

$$c_2(t) = \frac{\hbar}{2v_{21}^{(-)*}}\, e^{-i\Delta\omega t/2}\left[A(\Delta\omega + \Omega_{\mathrm{R}})e^{i\Omega_{\mathrm{R}}t/2} + B(\Delta\omega - \Omega_{\mathrm{R}})e^{-i\Omega_{\mathrm{R}}t/2}\right]. \tag{13.60}$$

Razmotrimo sada slučaj kada se kvantni sistem pre uključenja perturbacije (tj. za $t < 0$) nalazi u stanju $\varphi_1$. Tada opšta rešenja za koeficijente $c_1(t)$ i $c_2(t)$ moraju da zadovoljavaju početne uslove

$$c_1(0) = 1, \quad c_2(0) = 0. \tag{13.61}$$

Izrazi (13.59), (13.60) za $t = 0$, uzimajući u obzir ove uslove, svode se na sistem linearnih jednačina za koeficijente $A$ i $B$

$$A + B = 1, \quad A(\Delta\omega + \Omega_{\mathrm{R}}) + B(\Delta\omega - \Omega_{\mathrm{R}}) = 0, \tag{13.62}$$

čija su rešenja

$$A = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\Delta\omega}{\Omega_{\mathrm{R}}}\right), \quad B = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\Delta\omega}{\Omega_{\mathrm{R}}}\right). \tag{13.63}$$

Zamenjujući ove vrednosti u izraze (13.59), (13.60), nakon sređivanja, dobijamo

$$c_1(t) = e^{i\Delta\omega t/2}\left(\cos\frac{\Omega_{\mathrm{R}}t}{2} - i\frac{\Delta\omega}{\Omega_{\mathrm{R}}}\sin\frac{\Omega_{\mathrm{R}}t}{2}\right), \tag{13.64}$$

$$c_2(t) = e^{-i\Delta\omega t/2}\,\frac{V_{21}^{(0)}}{\hbar\Omega_{\mathrm{R}}}\sin\frac{\Omega_{\mathrm{R}}t}{2}. \tag{13.65}$$

Verovatnoća nalaženja sistema u stanju $\varphi_1$ u proizvoljnom trenutku $t$ nakon uključenja perturbacije, tj. za $t > 0$, iznosi

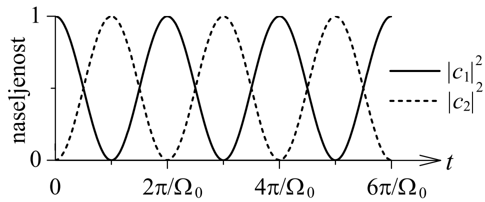
$$\mathcal{P}_1(t) = |c_1(t)|^2 = \cos^2\frac{\Omega_R t}{2} + \frac{\Delta\omega^2}{\Omega_R^2}\sin^2\frac{\Omega_R t}{2}, \tag{13.66}$$

dok je verovatnoća nalaženja sistema u stanju $\varphi_2$ (tj. verovatnoća prelaza $\varphi_1 \to \varphi_2$)

$$\mathcal{P}_2(t) = |c_2(t)|^2 = \frac{|V_{21}^{(0)}|^2}{\hbar^2\Omega_R^2}\sin^2\frac{\Omega_R t}{2}. \tag{13.67}$$

Verovatnoće $\mathcal{P}_1(t)$ i $\mathcal{P}_2(t)$ su periodične funkcije vremena sa frekvencijom oscilovanja jednakom Rabijevoj frekvenciji $\Omega_R$. Sabiranjem izraza (13.66) i (13.67), uz korišćenje izraza (13.58), lako se proverava da je $\mathcal{P}_1(t) + \mathcal{P}_2(t) = 1$. Uočimo da u slučaju rezonancije ($\Delta\omega = 0$) imamo $\mathcal{P}_1(t) = \cos^2(\Omega_0 t/2)$ i $\mathcal{P}_2(t) = \sin^2(\Omega_0 t/2)$ (slika 13.2).

Razmotrimo ovaj proces statistički. Ako u početnom trenutku imamo kvantni ansambl sa $N$ sistema u stanju $\varphi_1$, to stanje pod uticajem perturbacije evoluira i u trenutku $t > 0$ sistemi će biti u stanju superpozicije $c_1(t)\varphi_1 + c_2(t)\varphi_2$. Ako tada izvršimo merenje energije svih $N$ sistema, dobićemo da je njih $|c_1(t)|^2 N$ ostalo u stanju $\varphi_1$ sa energijom $E_1$, a $|c_2(t)|^2 N$ je prešlo u stanje $\varphi_2$ sa energijom $E_2$. U tom kontekstu veličine $|c_1(t)|^2$ i $|c_2(t)|^2$ nazivamo „naseljenostima” nivoa $E_1$ i $E_2$. Iz gornje analize sledi da, dok je perturbacija uključena, ove naseljenosti se periodično menjaju uz uslov da je njihov zbir u svakom trenutku jednak jedinici. Možemo reći da se pod uticajem perturbacije dešava naizmenični prenos (transfer) naseljenosti sa jednog nivoa na drugi. Ovu promenu naseljenosti nivoa nazivamo *Rabijevim oscilacijama*.




**Slika 13.2.** Promena naseljenosti nivoa $E_1$ i $E_2$ (Rabijeve oscilacije) pod uticajem periodične perturbacije čija je frekvencija rezonantna sa frekvencijom prelaza.

Ako bismo opisani problem analizirali koristeći perturbativni prilaz i aproksimaciju prvog reda, polazeći od izraza (13.41) za $v_{21}^{(-)}$, dobili bismo

$$\mathcal{P}_2^{(1)}(t) = |c_2^{(1)}(t)|^2 = \frac{|V_{21}^{(0)}|^2}{\hbar^2\Delta\omega^2}\sin^2\frac{\Delta\omega t}{2}. \tag{13.68}$$

Ako je $\Delta\omega$ veliko, imamo $\Omega_R \approx \Delta\omega$ i ovaj izraz je dobra aproksimacija izraza (13.67). Međutim, u slučaju rezonancije ($\Delta\omega = 0$) perturbativni izraz nije primenljiv.

## 13.3 Radijativni prelazi među atomskim stanjima

### 13.3.1 Dipolni prelazi

Posmatrajmo atom sa jednim elektronom koji interaguje sa elektromagnetnim poljem. Hamiltonijan ovog sistema može se napisati u obliku (13.1), gde neperturbovani hamiltonijan $\hat{H}_0$ opisuje kretanje elektrona u atomu izvan polja, a perturbacija $\hat{V}$ interakciju tog elektrona sa poljem. Smatraćemo da je svojstveni problem neperturbovanog hamiltonijana

$$\hat{H}_0 \varphi_n = E_n \varphi_n \tag{13.69}$$

rešen, tj. da znamo sve funkcije $\varphi_n$ i energije $E_n$.

Interakcija elektrona sa poljem, ukoliko je ono dovoljno slabo, ima oblik (v. odeljak 11.2.1)

$$\hat{V}(t) = \frac{e}{m_\mathrm{e}} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \tag{13.70}$$

gde je $\hat{\mathbf{A}}$ operator vektorskog potencijala polja, a $\hat{\mathbf{p}}$ operator impulsa elektrona. Pretpostavimo da je elektromagnetni talas polarizovan i neka je pravac polarizacije određen ortom $\boldsymbol{\epsilon}$. Tada je njegov vektorski potencijal[1]

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_0 \boldsymbol{\epsilon} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t). \tag{13.71}$$

Koristeći ovaj izraz, perturbacija (13.70) ima eksplicitan oblik

$$\begin{aligned} \hat{V}(t) &= \frac{e}{m_\mathrm{e}} A_0 (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \\ &= \frac{e}{m_\mathrm{e}} (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \left( \mathcal{A}_- e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + \mathcal{A}_+ e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right), \end{aligned} \tag{13.72}$$

gde su $\mathcal{A}_- = A_0/2i$, $\mathcal{A}_+ = \mathcal{A}_-^* = -\mathcal{A}_-$.

Posmatrajmo sada posebno delove izraza za perturbaciju koji odgovaraju emisiji, odnosno apsorpciji fotona

$$\hat{V}_\pm(t) = \frac{e}{m_\mathrm{e}} \mathcal{A}_\pm (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}) e^{\pm i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}. \tag{13.73}$$

Neka su $\varphi_\mathrm{i}$ i $\varphi_\mathrm{f}$ talasne funkcije koje opisuju početno i krajnje stanje atoma. Verovatnoća prelaza $\varphi_\mathrm{i} \to \varphi_\mathrm{f}$ u aproksimaciji prvog reda (izraz (13.42)) proporcionalna je kvadratu modula matričnog elementa

$$\langle \varphi_\mathrm{f} | \hat{V}_\pm | \varphi_\mathrm{i} \rangle = \frac{e}{m_\mathrm{e}} \mathcal{A}_\pm \boldsymbol{\epsilon} \cdot \langle \varphi_\mathrm{f} | e^{\mp i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | \varphi_\mathrm{i} \rangle e^{\pm i \omega t}. \tag{13.74}$$

[1] Za razliku od kvantne elektrodinamike, u kvantnoj mehanici elektromagnetno polje tretira se na klasičan način. U tom slučaju amplituda $A_0$ nije operator već parametar.

Ovde će nas zanimati kada su ovi matrični elementi jednaki nuli, odnosno različiti od nje, da bismo utvrdili koji su prelazi zabranjeni, a koji dozvoljeni. Poslednji izraz može se svesti na jednostavniji oblik koristeći tzv. dugotalasnu aproksimaciju. Naime, prelazi između atomskih stanja dešavaju se usled apsorpcije, odnosno emisije elektromagnetnog zračenja iz domena talasnih dužina od radio-talasa do ultraljubičaste svetlosti. Pošto su najkraće talasne dužine $\lambda$ u toj oblasti reda veličine $10^{-7}$ m (vidljiva i ultraljubičasta svetlost), a radijus atoma je $a \sim 10^{-10}$ m, proizilazi da je $\lambda \gg a$, odnosno $ka = 2\pi a/\lambda \sim 10^{-3} \ll 1$. Prema tome, u oblasti unutar atoma je $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \ll 1$, pa se može primeniti razvoj

$$e^{\mp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1 \mp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + \cdots \tag{13.75}$$

i zadržati samo osnovni član, tj. uzeti da je $e^{\mp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$. U tom slučaju imamo

$$\langle\varphi_{\mathrm{f}}|e^{\mp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle \approx \langle\varphi_{\mathrm{f}}|\hat{\mathbf{p}}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle. \tag{13.76}$$

Matrični element operatora impulsa dalje se može zameniti matričnim elementom operatora koordinate. Pošto hamiltonijan koji opisuje kretanje elektrona u atomu izvan polja ima oblik $\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m_{\mathrm{e}}) + V_{\mathrm{c}}(\hat{\mathbf{r}})$, gde je $V_{\mathrm{c}}(\hat{\mathbf{r}})$ je operator interakcije elektrona sa jezgrom, odnosno atomskim ostatkom (engl. *core*), imamo

$$\begin{aligned}[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}_0] &= [\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}^2/(2m_{\mathrm{e}}) + V_{\mathrm{c}}(\hat{\mathbf{r}})] = \frac{1}{2m_{\mathrm{e}}}[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}^2] = \frac{1}{2m_{\mathrm{e}}}\sum_{i,j}\mathbf{e}_i[\hat{x}_i, \hat{p}_j^2] \\ &= \frac{1}{2m_{\mathrm{e}}}\sum_{i,j}\mathbf{e}_i\Big\{\hat{p}_j\underbrace{[\hat{x}_i, \hat{p}_j]}_{i\hbar\delta_{ij}} + \underbrace{[\hat{x}_i, \hat{p}_j]}_{i\hbar\delta_{ij}}\hat{p}_j\Big\} = \frac{i\hbar}{m_{\mathrm{e}}}\sum_i \mathbf{e}_i\hat{p}_i = \frac{i\hbar}{m_{\mathrm{e}}}\hat{\mathbf{p}}.\end{aligned} \tag{13.77}$$

Prema tome

$$\begin{aligned}\langle\varphi_{\mathrm{f}}|\hat{\mathbf{p}}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle &= \frac{m_{\mathrm{e}}}{i\hbar}\langle\varphi_{\mathrm{f}}|[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}_0]|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle = \frac{m_{\mathrm{e}}}{i\hbar}\Big(\langle\varphi_{\mathrm{f}}|\hat{\mathbf{r}}\hat{H}_0|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle - \langle\varphi_{\mathrm{f}}|\hat{H}_0\hat{\mathbf{r}}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle\Big) \\ &= \frac{m_{\mathrm{e}}}{i\hbar}(E_{\mathrm{i}} - E_{\mathrm{f}})\langle\varphi_{\mathrm{f}}|\hat{\mathbf{r}}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle = -im_{\mathrm{e}}\omega_{\mathrm{if}}\langle\varphi_{\mathrm{f}}|\hat{\mathbf{r}}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle,\end{aligned} \tag{13.78}$$

gde su $E_{\mathrm{i}}$ i $E_{\mathrm{f}}$ svojstvene energije hamiltonijana $\hat{H}_0$ koje odgovaraju svojstvenim stanjima $\varphi_{\mathrm{i}}$ i $\varphi_{\mathrm{f}}$, odnosno

$$\langle\varphi_{\mathrm{f}}|\hat{\mathbf{p}}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle = im_{\mathrm{e}}\omega_{\mathrm{fi}}\langle\varphi_{\mathrm{f}}|\hat{\mathbf{r}}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle, \tag{13.79}$$

gde je $\omega_{\mathrm{fi}} = (E_{\mathrm{f}} - E_{\mathrm{i}})/\hbar$ frekvencija prelaza $\varphi_{\mathrm{i}} \to \varphi_{\mathrm{f}}$. Tada je u dugotalasnoj aproksimaciji

$$\langle\varphi_{\mathrm{f}}|\hat{V}_{\pm}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle = i\omega_{\mathrm{fi}}\mathcal{A}_{\pm}e^{\pm i\omega t}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\langle\varphi_{\mathrm{f}}|e\hat{\mathbf{r}}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle = -i\omega_{\mathrm{fi}}\mathcal{A}_{\pm}e^{\pm i\omega t}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{d}_{\mathrm{fi}}, \tag{13.80}$$

gde je

$$\mathbf{d}_{\mathrm{fi}} = -e\langle\varphi_{\mathrm{f}}|\hat{\mathbf{r}}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle = \langle\varphi_{\mathrm{f}}|\hat{\mathbf{d}}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle \tag{13.81}$$

matrični element *dipolnog momenta* $\hat{\mathbf{d}} = -e\hat{\mathbf{r}}$.

Na osnovu formule (13.43) verovatnoća prelaza u jedinici vremena iz početnog u krajnje stanje glasi

$$\begin{aligned} W_{\mathrm{fi}}^{\pm} &= \frac{2\pi}{\hbar}\,|\langle\varphi_{\mathrm{f}}|\hat{V}_{\pm}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle|^2\,\delta(E_{\mathrm{f}}-E_{\mathrm{i}}\pm\hbar\omega) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar}\,\omega_{\mathrm{fi}}^2|\mathcal{A}_{\pm}|^2\,|\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{d}_{\mathrm{fi}}|^2\,\delta(\hbar\omega_{\mathrm{fi}}\pm\hbar\omega) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar}\,\frac{I(\omega_{\mathrm{fi}})}{2\varepsilon_0 c}\,|\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{d}_{\mathrm{fi}}|^2\,\delta(\hbar\omega_{\mathrm{fi}}\pm\hbar\omega), \end{aligned} \tag{13.82}$$

gde je $I(\omega) = 2c\,\varepsilon_0\,\omega^2\,|\mathcal{A}_{\pm}|^2 = c\,\varepsilon_0\,\omega^2\,|A_0|^2/2$ intenzitet elektromagnetnog polja. Očigledno, verovatnoća prelaza različita je od nule kada je elektromagnetno polje u rezonanciji sa frekvencijom prelaza, tj. ako je $\omega = \mp\omega_{\mathrm{fi}}$. Integraleći poslednji izraz za $W_{\mathrm{fi}}^{\pm}$ po frekvenciji polja $\omega$ u nekom intervalu oko frekvencije prelaza $\omega_{\mathrm{fi}}$ i koristeći rezultat $\int\delta(\hbar\omega_{\mathrm{fi}}\pm\hbar\omega)\,\mathrm{d}\omega = 1/\hbar$, konačno se dobija

$$W_{\mathrm{fi}}^{\pm} = \frac{\pi I(\omega_{\mathrm{fi}})}{\hbar^2 c\varepsilon_0}\,|\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{d}_{\mathrm{fi}}|^2. \tag{13.83}$$

Vidimo da pri datom intenzitetu elektromagnetnog polja verovatnoća prelaza u dugotalasnoj aproksimaciji prvenstveno zavisi od vrednosti projekcije matričnog elementa električnog dipola na pravac polarizacije polja. Iz tog razloga zračenje emitovano pri prelazima koji se dešavaju kad je $\mathbf{d}_{\mathrm{fi}} \neq 0$ naziva se električno dipolno zračenje ili samo *dipolno zračenje* (E1), a dugotalasna aproksimacija zbog zanemarivanja viših multipola u razvoju (13.75) naziva se i *dipolna aproksimacija*.

## 13.3.2 Apsorpcija i stimulisana emisija zračenja

Formula (13.83) određuje stopu prelaza u dipolnoj aproksimaciji između atomskih stanja $\varphi_{\mathrm{i}}$ i $\varphi_{\mathrm{f}}$ pri *apsorpciji zračenja* (stopa $W_{\mathrm{fi}}^{-}$, pri čemu je $E_{\mathrm{f}} > E_{\mathrm{i}}$), odnosno *stimulisanoj emisiji zračenja* (stopa $W_{\mathrm{fi}}^{+}$, pri čemu je $E_{\mathrm{i}} > E_{\mathrm{f}}$). Obe vrste prelaza dešavaju se pod uticajem već prisutnog elektromagnetnog polja rezonantne frekvencije $\omega = |\omega_{\mathrm{fi}}|$ kao perturbacije. U prvom slučaju polje predaje kvant energije $\hbar\omega$ atomu (apsorpcija fotona), dok u drugom indukuje emisiju zračenja koje ima istu frekvenciju, polarizaciju i fazu kao ono. Posmatrajući elektromagnetno zračenje kao snop fotona, možemo reći da upadni foton energije $\hbar\omega$ stimuliše emisiju još jednog fotona sa istim karakteristikama. Upravo iz tog razloga emisija zračenja o kojoj je ovde reč naziva se „stimulisana”, za razliku od „spontane” emisije, o kojoj će biti reči u narednom odeljku. Uočimo da su stope prelaza između istog para stanja pri apsorpciji i stimulisanoj emisiji zračenja jednake. Na primer, ako su $\varphi_1$ i $\varphi_2$ dva atomska stanja, pri čemu je $E_1 < E_2$, imamo

$$W_{21}^{-} = W_{12}^{+}. \tag{13.84}$$

Ovo je u skladu sa termodinamičkim principom detaljnog balansa, koji kaže da je u zapremini koja sadrži atome i zračenje u ravnoteži stopa prelaza između dva stanja ista u oba smera.

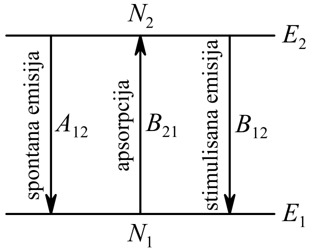
Ako je zračenje koje interaguje sa atomom nepolarizovano i izotropno, što karakteriše većinu zračenja koja se javljaju u prirodi, orijentacija vektora polarizacije $\boldsymbol{\epsilon}$ je nasumična, pa usrednjavanjem faktora $|\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{d}_{\mathrm{fi}}|^2 = \cos^2\vartheta\,|\mathbf{d}_{\mathrm{fi}}|^2$ po uglu $\vartheta$ dobijamo da izraz za stopu prelaza usled apsorpcije zračenja ima oblik

$$W_{\mathrm{fi}}^{-} = \frac{\pi I(\omega_{\mathrm{fi}})}{3\hbar^2 c\varepsilon_0}|\mathbf{d}_{\mathrm{fi}}|^2. \tag{13.85}$$

Što se tiče stimulisane emisije zračenja, ukoliko postoji veliki broj atoma u stanju sa višom energijom, ona može da pređe u lančanu reakciju, pri kojoj od jednog fotona nastaju dva, od dva četiri itd. (tzv. efekat lavine). Na ovom principu zasniva se pojačanje svetlosti stimulisanom emisijom zračenja, poznato pod akronimom LASER (engl. *the Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*). Naravno, ovo koherentno pojačanje može se desiti samo ako je većina atoma u stanju sa višom energijom, tj. ako se postigne tzv. inverzija naseljenosti. U suprotnom, došlo bi do apsorpcije koja bi smanjila broj fotona i ugasila efekat pojačanja. Pokazuje se da je za postizanje inverzije naseljenosti potrebno da kod atoma postoje metastabilna stanja više energije u koja se ti atomi prevode intenzivnim upadnim zračenjem (tzv. „pumpanjem”).

### 13.3.3 Spontana emisija zračenja. Ajnštajnovi koeficijenti

Osim apsorpcije i stimulisane emisije, moguća je i spontana emisija zračenja, pri čemu atom, naizgled bez spoljašnjeg uticaja, prelazi sa višeg energijskog nivoa na niži. Ova je emisija štaviše opštezastupljena pojava i odgovorna je za najveći deo zračenja koje se javlja u prirodi. Rigorozan opis spontane emisije zračenja zahteva prilaz gde se elektromagnetno polje opisuje preko njegovih kvanata, fotona. U kvantnoj elektrodinamici se pokazuje da se, koristeći formalizam druge kvantizacije (v. odeljak 7.2.4), hamiltonijan polja može predstaviti u obliku sume članova koji imaju oblik hamiltonijana linearnog harmonijskog oscilatora, od kojih svaki opisuje pobuđenja koja se manifestuju prisustvom fotona određenog tipa (izraz (7.89)). Odatle sledi da kvantovano elektromagnetno polje bez ijednog fotona, dakle u svom osnovnom stanju poznatom i kao stanje vakuuma, analogno linearnom harmonijskom oscilatoru poseduje tzv. energiju nulte tačke ili energiju vakuuma, koja je kod oscilatora jednaka polovini njegovog kvanta $\hbar\omega/2$, a kod polja je to suma doprinosa $\hbar\omega_i/2$, gde indeks $i$ prebrojava komponente polja koje se razlikuju po talasnim vektorima i po polarizaciji (izraz (7.91)). Spontana emisija tada se može protumačiti kao stimulisana emisija uzrokovana oscilovanjem elektromagnetnog polja u stanju vakuuma, koje se u literaturi obično naziva fluktuacijom vakuuma. Međutim, za razliku od prave stimulisane emisije, gde emitovani fotoni imaju istu fazu i isti pravac prostiranja kao upadno zračenje, faza i pravac prostiranja fotona u spontanoj emisiji su slučajni. Iz tog razloga kod spontane emisije se efekat pojačanja ne javlja. Umesto pomenutog rigoroznog prilaza, ovde ćemo predstaviti statistički opis apsorpcije i emisije zračenja, koji je razvio Ajnštajn 1916. godine pre pojave kvantne mehanike, a koji povezuje stopu prelaza za spontanu emisiju sa onim za apsorpciju i stimulisanu emisiju. Navedimo da je Ajnštajn prvi predvideo postojanje stimulisane emisije u okviru svoje teorije zračenja.




**Slika 13.3.** Spontana emisija, apsorpcija i stimulisana emisija kod sistema sa dva nivoa.

Sledeći Ajnštajna, pretpostavimo da se u nekoj oblasti prostora nalazi veliki broj atoma određene vrste (ansambl) i elektromagnetno zračenje, koji su u termodinamičkoj ravnoteži na apsolutnoj temperaturi $T$. To znači da se među različitim atomskim stanjima usled apsorpcije i emisije zračenja dešavaju prelazi, ali su stope prelaza takve da broj atoma u svakom od tih stanja u toku vremena ostaje isti. Pretpostavimo da se $N_1$ atoma nalazi u stanju $\varphi_1$ niže energije $E_1$ i $N_2$ atoma u stanju $\varphi_2$ više energije $E_2$ (slika 13.3). Broj atoma u jedinici vremena koji spontano prelaze iz stanja $\varphi_2$ u stanje $\varphi_1$, emitujući zračenje frekvencije $\omega = \omega_{21} \equiv (E_2 - E_1)/\hbar$, proporcionalan je broju $N_2$. Ako sa $A_{12}$ označimo stopu prelaza usled spontane emisije zračenja, koju ćemo ovde zvati *Ajnštajnovim koeficijentom za spontanu emisiju*, broj odgovarajućih prelaza u jedinici vremena biće $A_{12}N_2$. S druge strane, broj prelaza u jedinici vremena iz stanja $\varphi_1$ u stanje $\varphi_2$ usled apsorpcije zračenja rezonantne frekvencije $\omega = \omega_{21}$ proporcionalan je broju $N_1$, ali i spektralnoj gustini energije zračenja (energiji zračenja po jedinici zapremine i jedinici frekventnog opsega) $u_\omega$. Dakle, broj prelaza u jedinici vremena usled apsorpcije zračenja iznosi $B_{21}N_1u_\omega$, gde je $B_{21}$ *Ajnštajnov koeficijent za apsorpciju*. Konačno, broj prelaza u jedinici vremena iz stanja $\varphi_2$ u stanje $\varphi_1$ zbog stimulisane emisije zračenja rezonantne frekvencije $\omega = \omega_{21}$ proporcionalan je broju $N_2$ i spektralnoj gustini energije zračenja $u_\omega$. Prema tome, broj prelaza u jedinici vremena usled stimulisane emisije zračenja iznosi $B_{12}N_2u_\omega$, gde je $B_{12}$ *Ajnštajnov koeficijent za stimulisanu emisiju*. S obzirom na to da su atomi i elektromagnetno polje u termodinamičkoj ravnoteži, broj prelaza u jedinici vremena sa nižeg energijskog nivoa na viši nivo mora biti jednak broju prelaza u jedinici vremena u obrnutom smeru. Uzimajući u obzir sve tri vrste prelaza, imamo

$$A_{12}N_2 + B_{12}N_2u_\omega = B_{21}N_1u_\omega, \tag{13.86}$$

odakle sledi da je u slučaju termodinamičke ravnoteže spektralna gustina energije zračenja

$$u_\omega = \frac{A_{12}N_2}{B_{21}N_1 - B_{12}N_2}. \tag{13.87}$$

U sledećem koraku iskoristićemo rezultat Bolcmanove statistike po kome je verovatnoća da se sistem (atom) iz statističkog ansambla u termodinamičkoj ravnoteži nađe u kvantnom stanju energije $E$ proporcionalna Bolcmanovom faktoru $\exp(-E/k_BT)$.

Primenjujući ovaj rezultat na kvantna stanja $\varphi_1$ i $\varphi_2$, sledi da je količnik odgovarajućih verovatnoća[2]

$$\frac{\mathcal{P}_1}{\mathcal{P}_2} \equiv \frac{N_1}{N_2} = \exp\left(-\frac{E_1 - E_2}{k_\mathrm{B}T}\right) = e^{\hbar\omega_{21}/k_\mathrm{B}T}. \tag{13.88}$$

Ako se izraz (13.87) napiše u obliku $u_\omega = A_{12}/(B_{21}N_1/N_2 - B_{12})$, zamenjujući količnik $N_1/N_2$ izrazom (13.88) uz rezonantni uslov $\omega = \omega_{21}$, sledi

$$u_\omega = \frac{A_{12}}{B_{21}e^{\hbar\omega/k_\mathrm{B}T} - B_{12}}. \tag{13.89}$$

Poredeći Ajnštajnov izraz (13.89) za spektralnu gustinu energije zračenja sa Plankovim zakonom zračenja crnog tela (v. referencu u fusnoti 2)

$$u_\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3}\frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/k_\mathrm{B}T} - 1}, \tag{13.90}$$

dobijamo da je

$$B_{21} = B_{12} \tag{13.91}$$

i

$$A_{12} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} B_{12}. \tag{13.92}$$

Rezultat (13.91) ekvivalentan je rezultatu (13.84) koji smo dobili u dipolnoj aproksimaciji koristeći teoriju perturbacije prvog reda i koji odražava princip detaljnog balansa. Naime, ako broj prelaza u jedinici vremena usled apsorpcije i usled stimulisane emisije ($B_{21}N_1u_\omega$, odnosno $B_{12}N_2u_\omega$) predstavimo preko odgovarajućih stopa, tj. u obliku $W_{21}^{-}N_1$, odnosno $W_{12}^{+}N_2$, vidimo da je $W_{21}^{-} = B_{21}u_\omega$ i $W_{12}^{+} = B_{12}u_\omega$. Rezultat (13.91) se lako uopštava na slučaj kada su energijski nivoi $E_1$ i (ili) $E_2$ degenerisani. Označavajući sa $g_1$ i $g_2$ degeneraciju ovih nivoa, dobija se

$$g_1 B_{21} = g_2 B_{12}. \tag{13.93}$$

Rezultat (13.94) daje vezu između stope prelaza usled spontane emisije $W_{12}^{(\mathrm{sp})} = A_{12}$ i stope prelaza usled stimulisane emisije, tj.

$$W_{12}^{(\mathrm{sp})} = \frac{\omega^3}{\pi c^3}\frac{W_{12}^{+}}{u_\omega}. \tag{13.94}$$

Koristeći uz to vezu između intenziteta zračenja i spektralne gustine energije zračenja, $I(\omega) = cu_\omega$, dobijamo da je u dipolnoj aproksimaciji stopa prelaza usled spontane emisiju zračenja data izrazom

$$W_{\mathrm{fi}}^{(\mathrm{sp})} = \frac{\omega^3}{\pi\hbar c^3\varepsilon_0}|\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{d}_{\mathrm{fi}}|^2. \tag{13.95}$$

[2]Bolcmanov faktor i rezultat (13.88) opisani su npr. u knjizi „Termofizika” Kitela i Kremera (C. Kittel, H. Kroemer, *Thermal Physics*, W. H. Freeman and Company, 1980), str. 58-61. U istoj knjizi predstavljen je i Plankov zakon zračenja (str. 91).

Pošto zračenje koje nastaje spontanom emisijom iz atoma nema određeni pravac prostiranja i polarizacije, dakle izotropno je i nepolarizovano, adekvatan izraz za stopu prelaza dobija se usrednjavanjem po uglu $\vartheta$, analogno kao kod apsorpcije. Odgovarajući izraz glasi

$$W_{\mathrm{fi}}^{(\mathrm{sp})} = \frac{\omega^3}{3\pi\hbar c^3\varepsilon_0}|\mathbf{d}_{\mathrm{fi}}|^2. \tag{13.96}$$

## 13.3.4 Selekciona pravila za dipolne prelaze

Kao što smo videli iz prethodnog izlaganja, verovatnoća prelaza u dipolnoj aproksimaciji (izrazi (13.83) i (13.95)) proporcionalna je veličini

$$|\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{d}_{\mathrm{fi}}|^2 = |\boldsymbol{\epsilon}\cdot\langle\varphi_{\mathrm{f}}|e\hat{\mathbf{r}}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle|^2. \tag{13.97}$$

Da bi dipolni prelaz bio dozvoljen, ova veličina mora biti različita od nule, što se svodi na uslov $\langle\varphi_{\mathrm{f}}|\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\mathbf{r}}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle \neq 0$. Uslovi koji se odatle dobijaju nazivaju se *selekciona pravila*.

Za sisteme sa centralnom simetrijom, kao što su atomi, talasne funkcije početnog i konačnog (jednoelektronskog) stanja su oblika

$$\varphi_{\mathrm{i}} = R_{\mathrm{i}}(r)Y_{l_{\mathrm{i}}m_{l\mathrm{i}}}(\vartheta,\varphi), \quad \varphi_{\mathrm{f}} = R_{\mathrm{f}}(r)Y_{l_{\mathrm{f}}m_{l\mathrm{f}}}(\vartheta,\varphi), \tag{13.98}$$

gde su $l_{\mathrm{i}}$ i $l_{\mathrm{f}}$ orbitni, a $m_{l\mathrm{i}}$ i $m_{l\mathrm{f}}$ magnetni kvantni brojevi početnog i krajnjeg stanja.

Posmatrajmo prvo slučaj kada je svetlost *linearno polarizovana*. Neka je pravac polarizacije z-osa. U tom slučaju je $\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{r} = \mathbf{e}_z\cdot\mathbf{r} = z = r\cos\vartheta$, odnosno

$$\begin{aligned}\langle\varphi_{\mathrm{f}}|\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{r}|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle = \langle\varphi_{\mathrm{f}}|z|\varphi_{\mathrm{i}}\rangle &= \int \varphi_{\mathrm{f}}^* r\cos\vartheta\,\varphi_{\mathrm{i}}\,\mathrm{d}^3\mathbf{r} \\ &= \int_0^\infty R_{\mathrm{f}}(r)R_{\mathrm{i}}(r)r^3\mathrm{d}r\int_\Omega Y_{l_{\mathrm{f}}m_{l\mathrm{f}}}^*(\vartheta,\varphi)\cos\vartheta\,Y_{l_{\mathrm{i}}m_{l\mathrm{i}}}(\vartheta,\varphi)\,\mathrm{d}\Omega.\end{aligned}$$

Ako se kosinus ugla $\vartheta$ izrazi preko sfernog harmonika $Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta$, integral po uglovima glasi

$$\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\int_\Omega Y_{l_{\mathrm{f}}m_{l\mathrm{f}}}^* Y_{10}\,Y_{l_{\mathrm{i}}m_{l\mathrm{i}}}\,\mathrm{d}\Omega. \tag{13.99}$$

Koristeći ortogonalnost sfernih harmonika i adicionu formulu

$$Y_{10}\,Y_{lm_l} = a_1\,Y_{l+1,m_l} + a_2\,Y_{l-1,m_l}, \tag{13.100}$$

gde koeficijenti $a_1$, $a_2$ zavise od $l$ i $m_l$, integral po uglovima postaje

$$\begin{gathered}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left(a_1\int_\Omega Y_{l_{\mathrm{f}}m_{l\mathrm{f}}}^*\,Y_{l_{\mathrm{i}}+1,m_{l\mathrm{i}}}\,\mathrm{d}\Omega + a_2\int_\Omega Y_{l_{\mathrm{f}}m_{l\mathrm{f}}}^*\,Y_{l_{\mathrm{i}}-1,m_{l\mathrm{i}}}\,\mathrm{d}\Omega\right) = \\ \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,(a_1\delta_{l_{\mathrm{f}},l_{\mathrm{i}}+1} + a_2\delta_{l_{\mathrm{f}},l_{\mathrm{i}}-1})\,\delta_{m_{l\mathrm{f}}m_{l\mathrm{i}}}.\end{gathered} \tag{13.101}$$

Prema tome, imaćemo $\langle\varphi_\mathrm{f}|\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\mathbf{r}}|\varphi_\mathrm{i}\rangle \neq 0$ ako su $l_\mathrm{f} = l_\mathrm{i} \pm 1$ i $m_{l\mathrm{f}} = m_{l\mathrm{i}}$, što znači da je dipolni prelaz *dozvoljen* ako su promene orbitnog, odnosno magnetnog kvantnog broja

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m_l = 0. \tag{13.102}$$

Ovo su selekciona pravila za dipolne prelaze u slučaju linearno polarizovane svetlosti.

Ako je svetlost *cirkularno polarizovana*, ort polarizacije glasi $\boldsymbol{\epsilon} = (\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y)/\sqrt{2}$, odakle je

$$\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{r} \sim (\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y)\cdot\mathbf{r} = x \pm iy = \rho\, e^{\pm i\varphi} = r\sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi} = \mp\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\, r Y_{1,\pm 1}(\vartheta,\varphi), \tag{13.103}$$

gde je iskorišten izraz za sferni harmonik $Y_{1,\pm1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi}$. U ovom slučaju integral po uglovima glasi

$$\mp\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\int_\Omega Y^*_{l_\mathrm{f}m_{l\mathrm{f}}} Y_{1,\pm1} Y_{l_\mathrm{i}m_{l\mathrm{i}}}\,\mathrm{d}\Omega. \tag{13.104}$$

Koristeći formulu

$$Y_{1,\pm1}\, Y_{lm_l} = b_1^\pm\, Y_{l+1,m_l\pm1} + b_2^\pm\, Y_{l-1,m_l\pm1} \tag{13.105}$$

i ortogonalnost sfernih harmonika, gornji integral svodi se na

$$\mp\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\,(b_1^\pm\,\delta_{l_\mathrm{f},l_\mathrm{i}+1} + b_2^\pm\,\delta_{l_\mathrm{f},l_\mathrm{i}-1})\,\delta_{m_{l\mathrm{f}},m_{l\mathrm{i}}\pm1}. \tag{13.106}$$

Odavde proizilazi da je $\langle\varphi_\mathrm{f}|\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\mathbf{r}}|\varphi_\mathrm{i}\rangle \neq 0$ ako su $l_\mathrm{f} = l_\mathrm{i} \pm 1$ i $m_{l\mathrm{f}} = m_{l\mathrm{i}} \pm 1$, tj. dipolni prelaz je dozvoljen ako su promene orbitnog, odnosno magnetnog kvantnog broja

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m_l = \pm 1. \tag{13.107}$$

Ovo su selekciona pravila za dipolne prelaze kod cirkularno polarizovane svetlosti.

Konačno, za proizvoljnu polarizaciju selekciona pravila za dipolne prelaze glase

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m_l = 0, \pm 1. \tag{13.108}$$

Uočimo da su zbog veze kvantnog broja $l$ sa parnošću atomskih stanja ($P = (-1)^l$) i selekcionog pravila za taj kvantni broj dipolni prelazi mogući samo između stanja *suprotne parnosti*.

### 13.3.5 Multipolno zračenje

Ukoliko je dipolni matrični element jednak nuli, to ne znači da je odgovarajući prelaz potpuno zabranjen. U tom slučaju potrebno je uzeti u obzir *članove višeg reda* (multipole) u razvoju (13.75) i izračunati njihove matrične elemente.

Razmotrimo drugi član u razvoju. Odgovarajući matrični element glasi

$$M = \langle\varphi_\mathrm{f}|(\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}})(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\mathbf{p}})|\varphi_\mathrm{i}\rangle. \tag{13.109}$$

Pokazaćemo da $M$ uključuje doprinose električnog kvadrupola (E2) i magnetnog dipola (M1).

Neka je $\mathbf{k} \parallel \mathbf{e}_x$ i $\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{e}_y$. Tada je

$$\begin{aligned} M = M_z &= k\langle\varphi_\mathrm{f}|\hat{x}\hat{p}_y|\varphi_\mathrm{i}\rangle = k\langle\varphi_\mathrm{f}|\left(\frac{\hat{x}\hat{p}_y}{2} + \frac{\hat{x}\hat{p}_y}{2} + \frac{\hat{y}\hat{p}_x}{2} - \frac{\hat{y}\hat{p}_x}{2}\right)|\varphi_\mathrm{i}\rangle \\ &= \frac{k}{2}\langle\varphi_\mathrm{f}|(\hat{x}\hat{p}_y + \hat{y}\hat{p}_x)|\varphi_\mathrm{i}\rangle + \frac{k}{2}\langle\varphi_\mathrm{f}|(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)|\varphi_\mathrm{i}\rangle. \end{aligned} \tag{13.110}$$

Za prvi matrični element dobija se $\langle\varphi_\mathrm{f}|(\hat{x}\hat{p}_y + \hat{y}\hat{p}_x)|\varphi_\mathrm{i}\rangle = -im_\mathrm{e}\omega\langle\varphi_\mathrm{f}|\hat{x}\hat{y}|\varphi_\mathrm{i}\rangle$, gde je $\omega = (E_\mathrm{i} - E_\mathrm{f})/\hbar$, dok je u drugom $\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \hat{l}_z$. Prema tome,

$$M_z = -\frac{ik}{2}m_\mathrm{e}\omega\langle\varphi_\mathrm{f}|\hat{x}\hat{y}|\varphi_\mathrm{i}\rangle + \frac{k}{2}\langle\varphi_\mathrm{f}|\hat{l}_z|\varphi_\mathrm{i}\rangle. \tag{13.111}$$

Za druge orijentacije ($M_x$, $M_y$) dobijaju se izrazi analognog oblika.

Pokazuje da su matrični elementi $\langle\varphi_\mathrm{f}|\hat{x}\hat{y}|\varphi_\mathrm{i}\rangle$ različiti od nule samo ako su

$$\Delta l = 0, \pm 2, \quad \Delta m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \tag{13.112}$$

pri čemu u slučaju $l_\mathrm{i} = 0$ to važi samo ako je $l_\mathrm{f} = 2$. Zračenje koje se dešava poštujući ova selekciona pravila naziva se *kvadrupolno električno zračenje* (E2). Pošto se pri ovim prelazima orbitni kvantni broj ne menja ili menja za $\pm 2$, prelazi se dešavaju između nivoa *iste parnosti*.

Zračenje koje se dešava pri prelazima kada su matrični elementi $\langle\varphi_\mathrm{f}|\hat{l}_z|\varphi_\mathrm{i}\rangle$ (ili $\langle\varphi_\mathrm{f}|\hat{l}_x|\varphi_\mathrm{i}\rangle$ ili $\langle\varphi_\mathrm{f}|\hat{l}_y|\varphi_\mathrm{i}\rangle$) različiti od nule naziva se *magnetno dipolno zračenje* (M1). Kod sistema sa centralnom simetrijom nema prelaza ovog tipa. Međutim, ako je ova simetrija narušena, npr. ako se atom nalazi u spoljašnjem magnetnom polju, energijski nivoi zavise od $m$ (Zemanovo cepanje), pa su M1 prelazi mogući između Zemanovih podnivoa uz poštovanje selekcionih pravila

$$\Delta l = 0, \quad \Delta m_l = \pm 1. \tag{13.113}$$

Drugi razlog narušenja centralne simetrije može biti spin-orbitna interakcija.

# Bibliografija

## I. Osnovna literatura


1. B. H. Bransden, C. J. Joachain, *Quantum Mechanics*, 2nd edition, Pearson Education Limited, Harlow, England, 2000.
2. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics, Vol. 1*, Hermann and John Wiley & Sons, Paris, 1977.
3. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics, Vol. 2*, Hermann and John Wiley & Sons, Paris, 1977.
4. А. С. Давыдов, «Квантовая Механика», Наука, Москва, 1973; A. S. Davydov, *Quantum Mechanics*, Pergamon Press, London, 1965. (eng. prevod: D. ter Haar)
5. F. Herbut, *Kvantna mehanika za istraživače, I. deo*, Prirodno matematički fakultet Univerziteta u Beogradu, 1983.
6. F. Herbut, *Kvantna mehanika za istraživače, II. deo*, Prirodno-matematički fakultet Univerziteta u Beogradu, 1983.
7. A. Messiah, *Quantum Mechanics, Vol. I*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1961.
8. A. Messiah, *Quantum Mechanics, Vol. II*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1962.
9. N. Simonović, D. Kapor, *Kvantna mehanika 1*, Univerzitet u Banjoj Luci, Prirodno-matematički fakultet, Banja Luka, 2018.


## II. Dodatna literatura

### A. Kvantna mehanika


1. M. Burić, D. Latas, *Lekcije iz kvantne mehanike*, Univerzitet u Beogradu, Fizički fakultet, Beograd, 2019.
2. P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press, London, 1958.
3. S. Gasiorowicz, *Quantum Physics*, John Wiley & Sons, NJ, 2003.

4. D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall, Inc., Upper Saddle River, NJ, 1995.
5. D. Ivanović, *Kvantna mehanika*, Naučna knjiga, Beograd, 1974.
6. L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics – Non-relativistic Theory*, 3rd Ed., Pergamon Press Ltd., Oxford, 1977. (postoji izdanje na srpskom jeziku)
7. T. Xiang, *Building Blocks of Quantum Mechanics, Theory and Applications*, CRC Press, London, 2022.

## B. Matematička fizika

1. M. Damnjanović, *Hilbertovi prostori i grupe*, Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu, 2000.
2. S. R. Ignjatović, *Matematička fizika 3*, Univerzitet u Banjoj Luci, Prirodno-matematički fakultet, Banja Luka, 2015.
3. J. Mathews, R. L. Walker, *Mathematical Methods od Physics*, 2nd Edition, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1970.
4. Đ. Mušicki i B. Milić, *Matematičke osnove teorijske fizike*, Naučna knjiga, Beograd, 1975.

## C. Klasična teorijska mehanika

1. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, «Теоретическая физика – том I, Механика», Наука, Москва, 1988.
2. Đ. Mušicki, *Uvod u teorijsku fiziku, I deo, Teorijska mehanika*, Izdavačko-informativni centar studenata, Beograd, 1985.

CIP - Каталогизација у публикацији
Народна и универзитетска библиотека
Републике Српске, Бања Лука

530.14(075.8)(0.034.2)

СИМОНОВИЋ, Ненад
Kvantna mehanika [Elektronski izvor]. 2 / Nenad Simonović, Darko Kapor. - Onlajn izd. - Ел. књига. - Banja Luka : Univerzitet u Banjoj Luci : Prirodno-matematički fakultet, 2024

Način pristupa (URL): https://pmf.unibl.org/e-publikacije/. - Опис извора дана 18.11.2024. - Насл. са насл. екрана. - Ел. публикација у ПДФ формату опсега IX, 188 стр. - Напомене и библиографске референце уз текст. - Библиографија: стр. 187-188.

ISBN 978-99976-49-46-1

COBISS.RS-ID 141711617