KVANTNA MEHANIKA

Kvantna mehanika je razvijena kao odgovor na nemogućnost klasičnih teorija mehanike i elektromagnetizma da obezbede zadovoljavajuća objašnjenja nekih osobina elektromagnetnog zračenja i strukture atoma. Kao rezultat se pojavila teorija čijim osnovnim principima se mogla objasniti ne samo struktura atoma, molekula i čvrste materije već i elementarnih čestica unutar jezgra atoma, kao što su neutron i proton. Mada postoji još uvek mnogo karakteristika koje se ne mogu do kraja razumeti i objasniti, danas ne postoji osnovana sumnja da osnovne ideje kvantne mehanike nisu tačne. Da bi postigla ovakav uspeh kvantna mehanika je morala da bude razvijena na temeljima koji sadrže brojne koncepte koji radikalno menjaju naš pogled na svet, i na sam način funkcionisanja univerzuma. U ovom delu knjige ćemo se baviti osnovnim konceptima kvantne mehanike da bi u kasnijim poglavljima mogli doći i do naprednih principa i rešenja koje predlaže kvantna mehanika. Za kvantnu mehaniu se često misli da je jako teška materija, ne samo u konceptualnom smislu već i u matematici koja podupire te principe. Međutim, iako je neophodna prilično apstraktna formulacija za pravilno razumevanje predmeta, mnoge prividne komplikacije nestaju kada se rešava poprilično jenostavan sistem jednačina za neku konkretnu situaciju.

PLANKOVA KONSTANTA

Klasičnom fizikom dominiraju dva fundamentalna koncepta. Prvi je koncept čestice, diskretnog entiteta koji ima definisanu poziciju i impuls koji pokreće česticu u skladu sa Njutnovim zakonima kretanja. Drugi koncept je elektromagnetni talas, prošireni fizički entitet prisutan u svakoj tački prostora koji je predstavljen električnim i magnetnim poljem koji se menja u skladu sa Maksvelovim jednačinama elektromagnetizma. Klasična slika sveta je čista i uredna, zakoni kretanja upravljaju kretanjem materijalnog sveta oko nas, dok elektromagnetni zakoni upravljaju svetlošću koja nas obasjava. Klasična slika se počela raspadati 1900.godine, kada je Maks Plank objavio teoriju zračenja crnog tela, tj teoriju termalnog zračenja u ravnotežnom stanju za savršeno apsorpciono telo. Plank je objasnio poznate činjenice zračenja crnog tela, pretpostavkom da atomi emituju i apsorbuju diskretne kvante zračenja energije $h\nu$, gde je ν frekvencija zračenja a h je fundamentalna konstanta prirode koja iznosi :

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34}\, Js$$

Ovu konstantu zovemo Plankova konstanta.

FOTONI

Fotoni su kvanti elektromagnetnog zračenja slični česticama. Oni putuju brzinom svetlosti c, sa momentom p i energijom E u međusobnim relacijama :

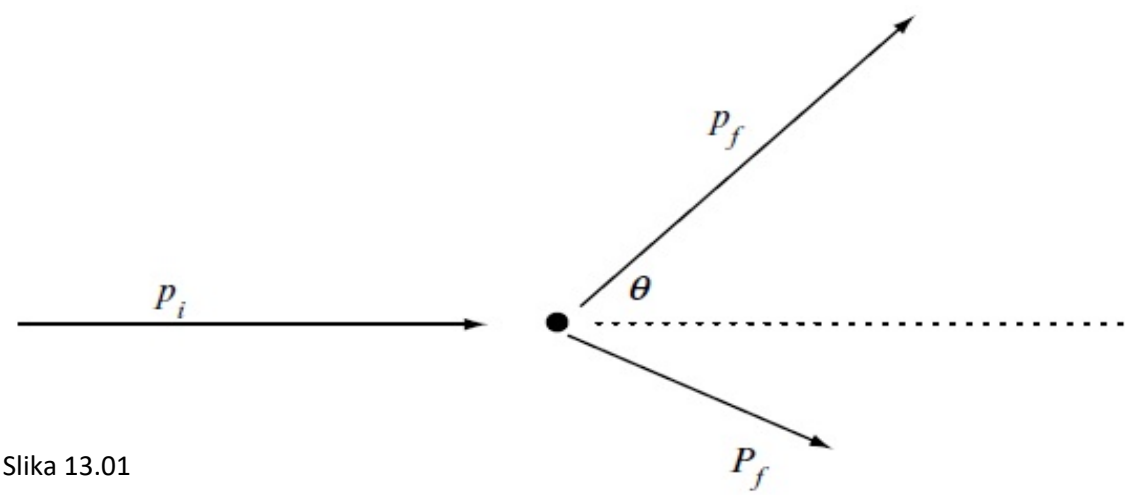
$$p = \frac{h}{\lambda} \quad ; \quad \epsilon = \frac{hc}{\lambda} \qquad (13.1)$$

, gde je λ talasna dužina elektromagnetnog zračenja. U poređenju sa makroskopskim standardima, moment i energija fotona su jako mali. Na primer, energija i impuls fotona sa talasnom dužinom iz vidljive oblasti sa $\lambda = 663$ nm su :

$$p = 10^{-27} Js, E = 3 \cdot 10^{19} J$$

Često se energija fotona izražava u jedinicama eV koja iznosi $1eV = 1.602 \cdot 10^{-19}\, J$. Fotoni iz vidljivog dela spektra imaju energiju reda eV, dok fotoni X-zračenja imaju energije reda 10 keV. Dokazi o postojanju fotona su se pojavili u prvih 20 godina dvadesetog veka. Ubedljiv dokaz se pojavio 1923.godine kada je A.H.Kompton pokazao da talasna dužina X-zraka raste kada dođe do rasejanja na atomskim elektronima. Ovaj efekat poznat pod nazivom Komptonov efekat, može biti shvaćen pod pretpostavkom da proces rasejanja- interakcija između fotona i elektrona poštuje zakon o očuvanju energije i impulsa. Kao što se vidi sa slike 13.01, incidentni foton predaje impuls elektronu tako da rasejani foton ima manji impuls i veću talasnu dužinu. U stvari, kada je foton rasejan pod uglom θ na elektron mase m_e, povećanje talasne dužine je dato sa :

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos\theta) \quad (13.2)$$



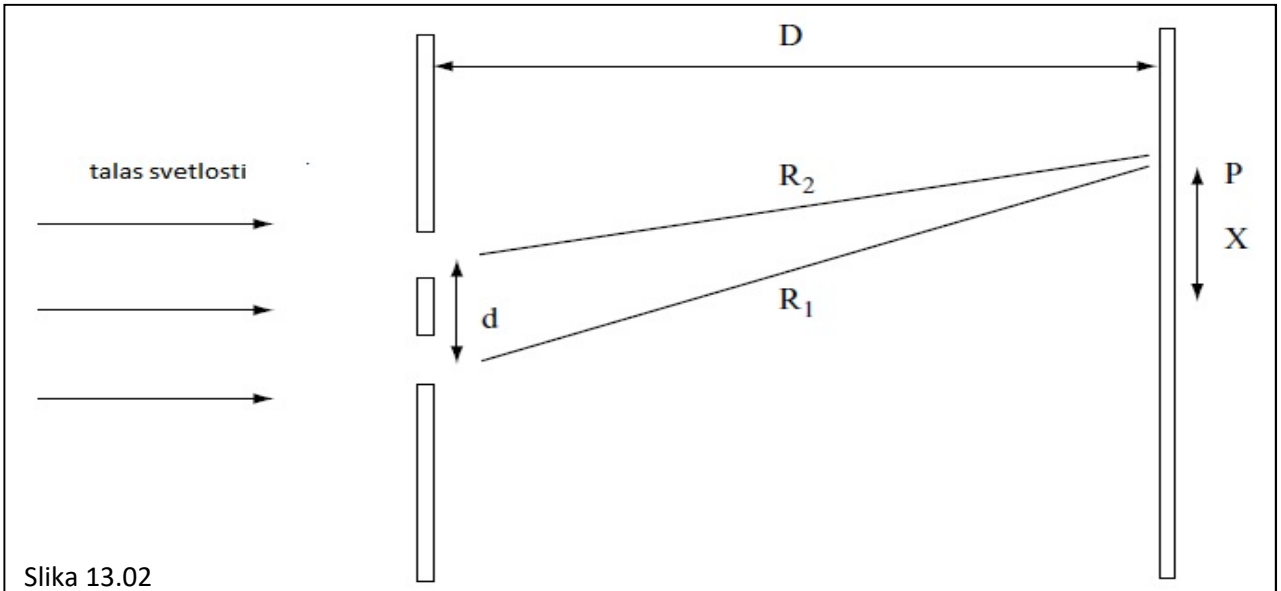
Slika 13.01

Napomenimo da veličinu promene talasne dužine određuje prvi član sa desne strane jednačine :

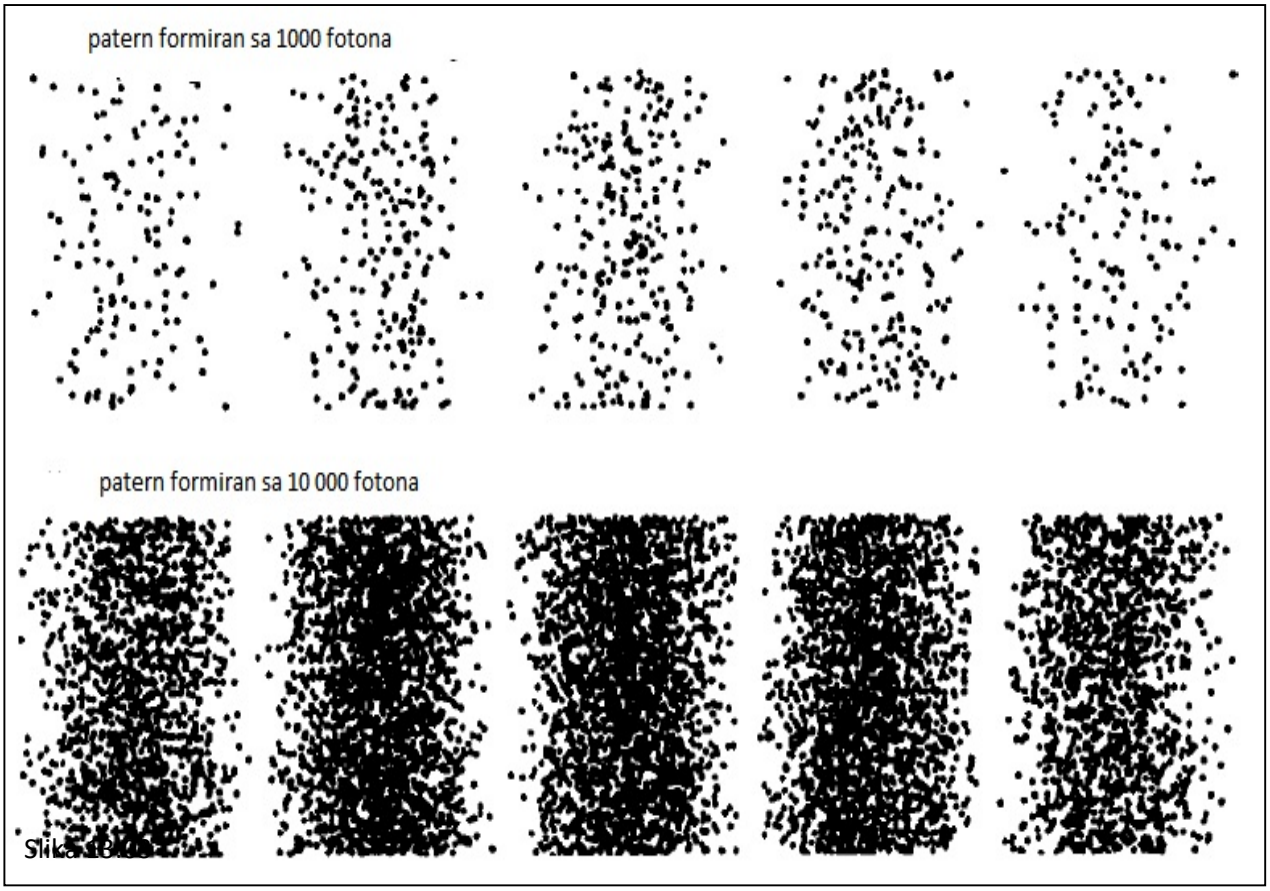
$$\frac{h}{m_e c} = 2.43 \cdot 10^{-12} m$$

, što zovemo fundamentalnom Komptonovom talasnom dužinom elektrona. Koncept fotona obezbeđuje prirodno objašnjenje za mnoge elektromagnetne fenomene kao što je fotoelektrični efekat. Međutim, nije jasno kako foton može da pridonese talasnim osobinama elektromagnetnog zračenja. Ilustrovaćemo ove teškoće preko eksperimenta sa dva proreza koji je još 1801.godine izvodio Tomas Jang da bi odredio talasnu dužinu svetlosti. Suštinski eksperiment sa dva proreza možemo prikazati kao na slici 13.02. Kada elektromagnetni talas prolazi kroz dva proreza oni na zastoru formiraju interferencijsku sliku. Ta interferencijska slika nastaje usled sabiranja dva talasa koji prolaze kroz proreze. Tamo gde se vrh i dolja poklapaju dolazi do poništenja talasa, a tamo gde se poklapaju vrh jednog sa vhom drugog talasa ili obrnuto kada se preklapaju dolje talasa imamo na zastoru jasno vidljiv interferencijski trag.

Pažljivim pregledom interferencijske slike utvrđujemo da je ona posledica ogromnog broja fotona koji udaraju u ekran na zastoru kao što se vidi sa slike 13.03.



Slika 13.02



Slika 13.03

Kada je intezitet svetlosti nizak, interferencijska slika se formira sporo, kako jedan po jedan pristižu fotoni i udaraju nasumično u tačke ekrana. Ovi fotoni se ne ponašaju kao klasične čestice sa jasno definisanom trajaktorijom. Umesto toga izgleda da foton prolazi kroz obadva proreza dospevajući na slučajnu poziciju na ekranu. Na prvi pogled ovo dualno ponašanje fotona izgleda pomalo čudno, ali kao što ćemo se kasnije uveriti veoma slična ponašanja ispoljavaju i elektroni, protoni i atomi.

De Broljovi talasi

Mogućnost da se čestica materija kao što je elektron ponaša i kao čestica i kao talas prvi put je 1923.godine ukazao Luis de Brolj. Konkretno, on je predložio da se čestica materije impulsa p može ponašati kao talas, talasne dužine $\lambda = h/p$. Ovu talasnu dužinu zovemo de Broljova talasna dužina. Često je korisno de Broljovu talasnu dužinu izražavati preko energije i impulsa čestice mase m :

$$\epsilon^2 - p^2c^2 = m^2c^4 \quad (13.3)$$

Odavde sledi da je de Broljova talasna dužina čestice sa relativističkom energijom E :

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{(\epsilon - mc^2)(\epsilon + mc^2)}} \quad (13.4)$$

Kada je čestica ultra-relativistička možemo zanemariti mc^2 pa je :

$$\lambda = \frac{hc}{\epsilon} \quad (13.5)$$

, što predstavlja jednačinu koja se slaže sa (13.1) kada se radi o fotonu. Kada čestica nije relativistička tada vredi :

$$\epsilon = mc^2 + E_k \quad (13.6)$$

, gde je E_k kinetička energija nerelativističke čestice , $E_k = p^2/2m$, pa na kraju dobijamo :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} \quad (13.7)$$

U praksi je talasna dužina čestice materije jako mala i veoma teško ju je izmeriti. Međutim, iz poslednje jednačine vidimo da čestice manje mase imaju veće talasne dužine, što implicira da talasne dužine lakših čestica materije kao što su elektroni mogu da se detektuju. Talasna dužina nerelativističkog elektrona se dobija zamenom mase elektrona $m_e = 9.109 \cdot 10^{-31} kg$ u jednačinu (13.7), odakle dobijamo da je talasna dužina elektrona :

$$\lambda = \sqrt{\frac{1.5}{E_k}}\, nm \quad (13.8)$$

Iz ove jednačine se odmah vidi da elektron energije 1.5 eV ima talasnu dužinu od 1.0 nm, do elektron energije 15 keV ima talasnu dužinu od 0.01 nm.

Pošto su ove talasne dužine poredive sa udaljenostima između atoma u kristalima materije, elektroni sa energijama eV do keV, su difraktovani kristalnom rešetkom. Prvi eksperimenti koji su pokazali ovo su bili eksperimenti C.J. Davisona i L.H.Germera i G.P. Tompsona iz 1927.godine. Davisonov eksperiment je uključivao elektrone energije oko 54 eV i talasne dužine 0.17 nm koji su bili difraktovani regularnim nizom atoma sa površine nikla. U Tompsonovom eksperimentu elektroni sa energijom od oko 40 keV i talasnom dužinom 0.006 nm su prolazili kroz polikristali i difraktovani preko nasumično orjentisanih mikrokristala. Ovi eksperimenti su nesumnjivo pokazali da elektroni imaju talasna svojstva određena de Broljovom talasnom dužinom. Posle 1927.godine, mnogi eksperimenti su potvrdili da protoni, neutroni, atomi i moekuli imaju talasna svojstva. Međutim, konceptualne implikacije su najbolje analizirane reko eksperimenta sa dva proreza. Fotoni koji prolaze kroz ova dva proreza na ekranu zaslona prikazuju sliku koja se dobija interferencijom talasa. Slično ponašanje pokazuju i elementarne čestice u istom eksperimentu. Izvedeni su brojni eksperimenti na ovu temu i uvek je dobijan identičan rezultat - interferencijska slika na ekranu zaslona. Eksperimenti su izvođeni sa raznim materijalima koji mogu da emituju čestice u pravilnim vremenskim razmacima i uvek je izgledalo da svaka pojedinačna čestica prolazi kroz obadva proreza. Ovakvo ponašanje čestica je sasvim u suprotnosti s bilo kakvom logikom koju naš mozak može da prihvati. Svaka interferencijska slika je rezultovala sa tamnim šarama na ekranu na međusobnim rastojanjima $\lambda D/d$, gde je d razmak između proreza a D udaljenost ekrana od proreza, a λ de Broljova talasna dužina. Međutim i dalje se u fizici koristi reč čestica za ove neshvatljive mikroskopske entitete. Možemo živeti sa ovim ali često ćemo da koristimo i termin kvantna čestica da naglasimo dvojako ponašanje tih objekata.

Atomi

Dobro je poznato da atomi ekzistiraju u stanju diskretne ili kvantne raspodele energije. Na slici 13.04 su prikazani energetski nivoi atoma vodonika koji se sastoji od jednog elektrona i jednog protona. Kasnije ćemo pokazati da vezana stanja elektrona i protona imaju kvantne nivoe date sa :

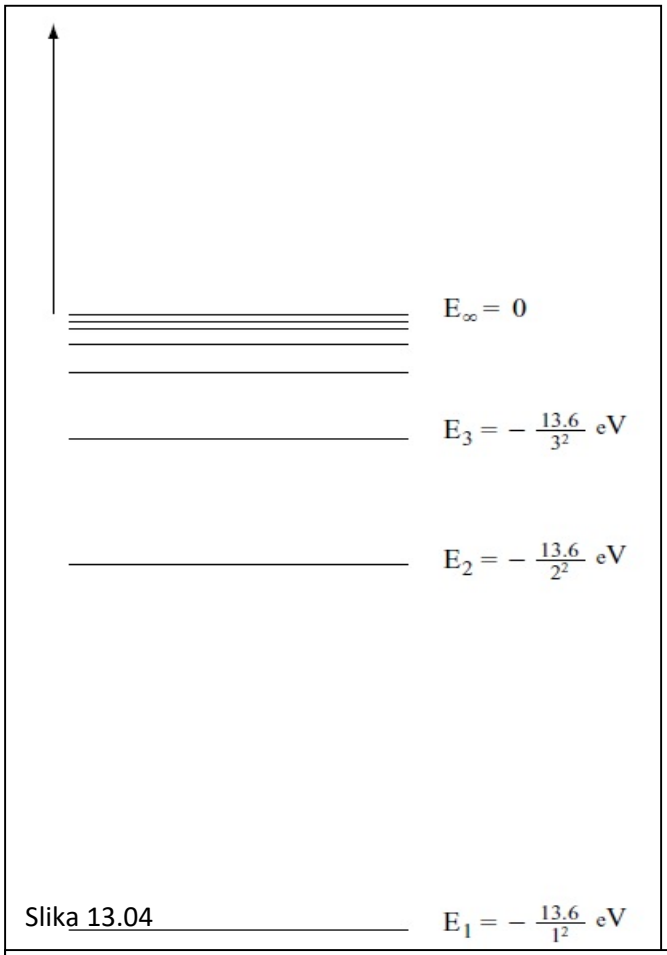
$$E_n = -\frac{13.6}{n^2}\, eV \qquad (13.9)$$

, gde je n ceo broj, koga zovemo glavni kvantni broj. Osnovno stanje atoma vodonika ima n=1, prvo pobuđeno stanje n=2 itd. Kada je eksitaciona energija veća od 13.6 eV, elektron nije više vezan za proton, atom je jonizovan pa njegova energija u principu može da uzme bilo koju vrednost od nula do beskonačno. Postojanje kvantnih energetskih nivoa atoma je demonstrirano kroz posmatranja elektromagnetnog spektra sa oštrim spektralnim linijama, koje nastaju kada atom pravi prelaz između dva kvantna energetska nivoa. Na primer tranzicija stanja vodonikovog atoma sa n_i na n_f dovodi do spektralne linije talasne dužine λ date sa :

$$\frac{hc}{\lambda} = \left|E_{n_i} - E_{n_f}\right| \qquad (13.10)$$

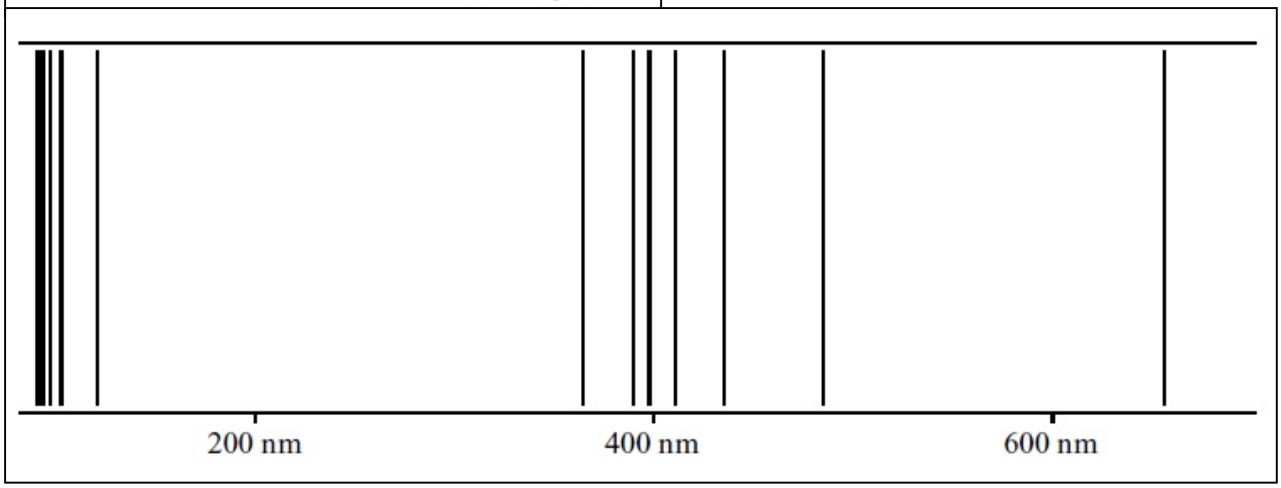
Neke od spektralnih linija vodonika vidimo na slici 13.05. Kvantni energetski nivoi atoma mogu biti otkriveni i u procesu rasejanja. Na primer, kada elektron prolazi kroz živinu paru, ima visoku verovatnoću gubitka energije, ako njegova energija prevazilazi 4.2 eV, što je razlika između kvantnih nivoa osnovnog i

prvog pobuđenog stanja atoma žive. Štaviše, kada se ovo desi pobuđeni atom žive posle toga emituje foton energije $\epsilon = 4.2\ eV$ i talasne dužine : $\lambda = hc/\epsilon = 254\ nm$.



Slika 13.04

Kvantni energetski nivoi nisu najčudnije svojstvo atoma. Atomi su iznenađujuće otporni, u većini situacija ostaju nepromenjeni kada se sudaraju sa susednim atomima, ali čak i kada su pobuđeni ovim sudarima veoma brzo se vraćaju u izvorno, prvobitno stanje. Pore toga atomi istog hemijskog elementa su identični. Na neki način atomski broj Z, koji predstavlja broj elektrona u atomu, podešava specifičan identitet koji je zajednički za sve atome sa ovim brojem elektrona. Na kraju postoji širok opseg različitih hemijskih osobina, ali začudo mala varijacija veličine. Na primer atom žive sa 80 elektrona je samo tri puta veći od atoma vodonika koji ima samo jedan elektron. Ove izuzetne osobine atoma pokazuju da atom nije mini solarni sistem u kome elektroni slede jasno definisane putanje oko jezgra atoma. Takav atom bi bio nestabilan, jer orbitrirajući elektroni bi emitovali energiju i padali na jezgro. Čak i bez zračenja energije atom bi se zbog sudara sa drugim atomima menjao, tj menjale bi mu se putanje takvih ellektrona.



Dakle, klasična slike na može da objasni stabilnost atoma, zašto atomi istih hemijskih elemenata imaju uvek isti broj elektrona i zašto atomi imaju tako male varijacije veličine.

U stvari, atomi se mogu razumeti jedino ako se fokusiramo na talasne osobine elektrona u atomu. U izvesnom smislu atomi se ponašaju kao muzički instrumenti. Kada struna violine vibrira nekom određenom frekvencijom ona formira stojeći talas, obrazac specifičnog oblika. Kada su elektroni koji se ponašaju kao talasi, sa određenom energijom, ograničeni unutar atoma i oni formiraju odgovarajući talasni obrazac. Atom je elastičan, pa kada je izolovan, on zauzima oblik elektronskog talasa najniže energije, a kada je u ovom stanju postoji tendencija elektrona da zrače energiju i da padaju na jezgro. Međutim, atomi mogu biti i pobuđeni i tada elektroni zauzimaju talasne oblike koji odgovaraju većim energijama. Jedna od najčudnijih karakteristika elektrona u atomu je to što se ne može jednoznačno odrediti koji elektron je koji. Rezultat ovoga je da elektroni mogu da zauzmu samo neke talasne oblike i to one koji su u saglasnosti sa principom koji zovemo Paulijev princip isključivosti. Ovi obrasci, za atome sa atomskim brojem Z, jedinstveno određuju hemijske osobine svih atoma sa tim atomskim brojem. Sve ove ideje ćemo kasnije detaljnije razmatrati ali ovde je dobro odgovoriti na ta osnovna pitanja a jedno od njih je i to o veličini atoma. Pošto de Broljova talasna dužina elektrona zavisi po veličini od Plankove konstante i mase elektrona, tako i veličina atoma u kome se elektroni ponašaj kao talasi zavisi od ovih parametara. Takođe očekujemo da zavisi i od sile koja vezuje elektron za jezgro koja je proporcionalna sa $e^2/4\pi\varepsilon_0$, gde je e naelektrisanje elektrona. Dakle, kada se radi o veličini atoma, očekujemo da bude funkcija $e^2/4\pi\varepsilon_0$, m_e i h ili $\hbar$ $(h/2\pi)$. U stvari prirodna jedinica za veličinu atoma je Borov radijus definisan sa :

$$a_0 = \left[\frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\right]\frac{\hbar^2}{m_e} = 0.529 \cdot 10^{-10}\, m \quad (13.11)$$

Imajući u vidu prirodne jedinice, možemo i vezujuću energiju atoma izraziti na isti način :

$$E_R = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0} = 13.6\, eV \quad (13.12)$$

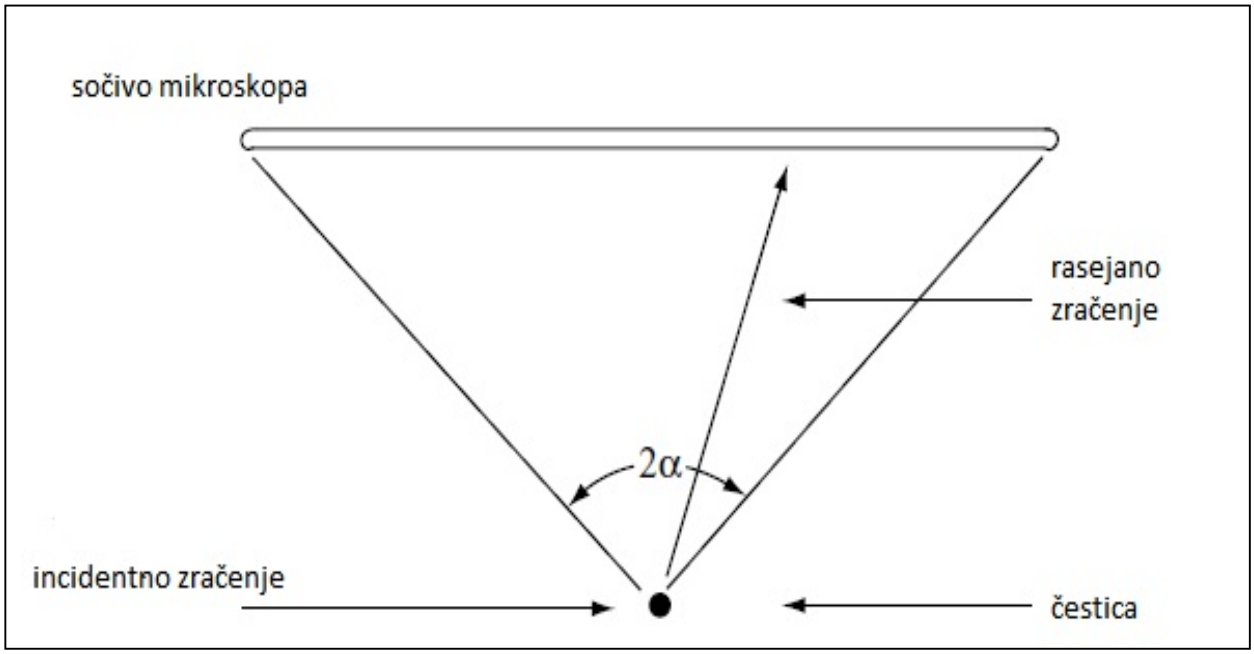
Ova energija se zove Rajdbergova energija. Podestimo se da je i kvantni broj vodonikovog atoma povezan sa ovom energijom preko relacije : E_R/n^2. Borov radijus je uveo Nils Bor 1913.godine u radu koji je predstavljao veoma uspešan model atoma. Iako je Borov model bio kombinacija zastarele klasične fizike i ad-hok postulata ipak je centralna teza i dalje upotrebljiva. A ta teza kaže da Plankova konstanta igra ključnu ulogu u mehanici elektrona. Deset godina nakon ovog rada je shvatio da Plankova konstanta ima ulogu u atomima jer povezuje čestična i talasna svojstva elektrona u atomu.

Merenja

U klasičnoj fizici čin merenja ne bi trebalo da ima uticaja na objekat jer se on može napraviti proizvoljno malim. Shodno tome, svojstva klasičnog objekta mogu biti određena precizno bez pozivanja na sam čin merenja. Međutim, ovaj princip ne važi u kvantnoj fizici. Ovde merenja igraju aktivnu i možda i presudnu ulogu. Zbog toga, kvantne čestice se najbolje opisuju u kontekstu mogućih ishoda merenja. Ovde ćemo ilustrovati ulogu merenja uvodeći Hajzenbergov princip neodređenosti kako se njegovim korišćenjem može obezbediti okvir za opis čestičnih i talasnih osobina kvantnih čestica.

PRINCIP NEODREĐENOSTI

Najbolje je princip neodređenosti uvesti kroz originalnu ideju, kroz čuveni misaoni eksperiment Varnera Hajzenberga o merenju položaja čestice pomoću mikroskopa. Razmotrimo šta se dešava sa česticom koja je iluminirana i resejana u pravcu sočiva mikroskopa (Slika 13.06).



Slika 13.06.- Merenje položaja čestice pomoću mikroskopa

Obzirom na talasnu prirodu svetlosti, mikroskop ima konačnu prostornu razlučnu moć. Ovo znači da pozicija posmatrane čestice ima neodređenost koju aproksimativno možemo napisati u obliku :

$$\Delta x \approx \frac{\lambda}{\sin\alpha} \qquad (13.13)$$

, gde je λ talasna dužina incidentne svetlosti, a 2α je ugao koji zaklapa sočivo mikroskopa sa česticom. Primetimo da rezolucija može biti poboljšana smanjenjem talasne dužine incidentnog zračenja, talasi vidljivog spektra su bolji od mikrotalasa a X-talasi su bolji od vidljivih. Međutim, obzirom na čestične osobine svetlosti, posmatranje uključuje bezbrojne sudare foton-čestica, sa rasejanim fotonima koji stižu do sočiva mikroskopa. Da bi stigao do sočiva rasejani foton mora imati bočni impuls između :

$$-\frac{h}{\lambda}\sin\alpha \;\; i \;\; \frac{h}{\lambda}\sin\alpha$$

Bočni impuls rasejanih fotona je neizvestan do stepena :

$$\Delta p \approx \frac{h}{\lambda}\sin\alpha \qquad (13.14)$$

Bočni impuls čestice ima sličnu neizvesnost zbog principa očuvanja impulsa kod rasejanja fotona. Primetimo da možemo smanjiti neodređenost impulsa čestice povećavajući talasnu dužinu incidentnog zračenja, ali bi ovo rezultovalo smanjenjem rezolucije mikroskopa čime bi povećali neodređenost položaja čestice. Zaista, kombinujući jednačine (13.13) i (13.14) dobijamo da se neodređenost položaja i impulsa čestice aproksimativno može napisati u obliku :

$$\Delta x \Delta p \approx h \quad (13.15)$$

Ovaj rezultat zovemo Hajzenbergov princip neodređenosti. On potvrđuje da veća preciznost u merenju pozicije ide na račun veće nepreciznosti u merenju impulsa i obrnuto. Precizna definicija principa je da fundamentalne neizvesnosti u istovremenosti znanja pozicije i impulsa poštuju nejednakost :

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \qquad (13.16)$$

Hajzenbergov princip kaže da precizno određivanje položaja $\Delta x = 0$, znači potpunu neodređenost impulsa. U stvari, misaonim eksperimentom sa mikroskopom, kada uzmemo u obzir i Komptonov efekat, pokazujemo da je precizno određivanje pozicije nemoguće. Prema Komptonovom efektu, talasna dužina rasejanog fotona se povećava sa :

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta) \quad (13.18)$$

, gde je m masa posmatrane čestice, a θ je ugao rasejanja koji zauzima foton u odnosu na sočivo mikroskopa. To podrazumeva da čak i ako osvetlimo česticu sa zracima talasne dužine nula, da bi dobili najbolju moguću rezoluciju mikroskopa, zračenje koje dolazi na sočivo mikroskopa ima talasnu dužinu reda h/mc. Odavde sledi da najbolja rezolucija data jednačinom (13.13) je :

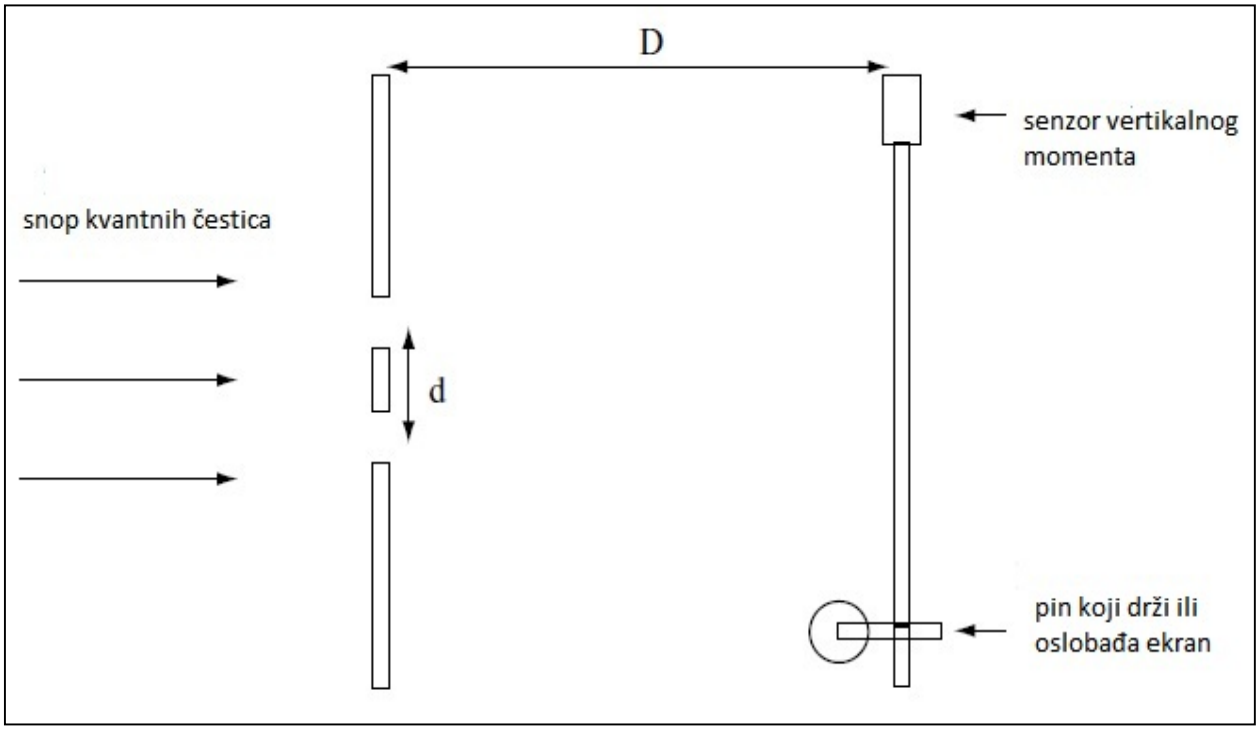
$$\Delta x \approx \frac{\lambda}{\sin\alpha} \sim \frac{h}{mc\sin\alpha} \quad (13.19)$$

, što znači da minimum neodređenosti položaja posmatrane čestice je proporcionalan sa h/mc. Ovaj misaoni eksperiment sa mikroskopom je dobr ailustracija uloge Plankove konstante u merenjima. Minimum neodređenosti u položaju i impulsu posmatrane čestice je dat relacijom $\Delta x \Delta p \approx h$, a minimum neodređenosti položaja nije nula ali je reda h/mc. Međutim, moramo da budemo svesni da Hajzenbergov eksperiment sa mikroskopom može nas dovesti u zabludu. Ne treba ni u jednom momentu pomisliti da čestica stvarno može imati definitivnu poziciju i impuls i pripisati nemogućnost njihovog određivanja nedovoljno dobrim merenjima. Drugim rečima, ne postoji ni jedan dokaz da čestica ima definitivnu poziciju ili impuls. Ovaj koncept je posledica neopservabilne idealizacije i postulata klasične fizike. Dakle, Hajzenbergov princip neodređenosti nam govori koliko daleko možemo ići u korišćenju klasičnih koncepata čestice, a da ne dođemo u sukob sa realnošću.

MERENJA I ČESTIČNO-TALASNA DUALNOST

U praksi, čestična svojstva kvantne čestice se određuju njenom detekcijom dok se talasna svojstva očitavaju iz nasumične prirode posmatranih čestica. Na primer u eksperimentu sa dva proreza, čestičnu

prirodu utvrđujemo kada vidimo tačku na ekranu zastora, dok talasnu prirodu vidimo kao iznenađujuću sveukupnu sliku koju vidimo na ekranu, zbog koje nam se nameće zaključak da čestica nekako prolazi kroz obadva proreza. Međutim izvedena svojstva kvantne čestice zavise od merenja koja mogu biti izvedena u ovom eksperimentu. Da bi ilustrovali subjektivne karakteristike kvantnih čestica, poslužićemo se modifikovanim eksperimentom sa dva proreza, u kome ćemo ekranu na zastoru ili fiksirati poziciju ili mu dozvoliti da se kreće kao na slici 13.07.



Slika 13.07. Modifikovani eksperiment sa dva proreza

Kada ubacimo pin u položaj da fiksira ekran, na ekranu ćemo zabeležiti precizne lokacije udara čestica kao i šare čija udaljenost zavisi od $\lambda D/d$. Kada pin prebacimo u drugi položaj pa se ekran počne kretati, tj postane mobilni detekcioni sistem, on postaje osetljiv na impuls $p = h/\lambda$ kojim čestice pogađaju ekran. Ekran se pokrene kada čestica stigne do njega i možemo veoma precizno izmeriti koliki je taj trzaj mereći vertikalni impuls čestice otkrivene na ekranu, a time možemo i posredno odrediti kroz koji prorez je došla ova čestica. Na primer u blizini centra ekrana, čestica iz gornjeg proreza ima impuls naniže $pd/2D$, a čestica iz donjeg proreza ima isti taj impuls ali naviše. Generalno, razlika vertikalnih impulsa čestica iz dva proreza je aproksimativno : $\Delta p \approx pd/D$. Dakle impuls pokretnog ekrana se meri sa tačnošću

$$\Delta p \approx \frac{pd}{D} \qquad (13.20)$$

, pomoću koje možemo odrediti odakle potiče čestica. Kada je to slučaj, prolazak kvantne čestice kroz obadva proreza nije moguć i ne bi trebalo da na ekranu nastane dobro poznata interferencijska slika. Ova konstatacija može da se razmotri u svetlu neodređenosti koja je uključena u sam proces merenja.

Ekran je regulisan Hajzenbergovim principom neodređenosti i precizno merenje njegovog impulsa je moguće samo na račun nepreciznosti merenja njegovog položaja. Ako je neodređenost vertikalnog impulsa ekrana $\Delta p \approx pd/D$, takva da možemo da identifikujemo prorez kroz koji prolaze čestice, onda minimalna neodređenost u položaju ekrana je :

$$\Delta x \approx \frac{h}{\Delta p} \approx \frac{hD}{pd} \qquad (13.21)$$

Ova neodređenost položaja može biti izražena i preko talasne dužine čestice. Koristeći $p = h/\lambda$, dobijamo :

$$\Delta x \approx \frac{\lambda D}{d} \qquad (13.22)$$

Treba primetiti da bi ova neodređenost u vertikalnom položaju ekrana sprala interferencijsku sliku čije su šare razdvojene za $\frac{\lambda D}{d}$. Dakle, oslobađanjem ekrana da se može pomerati vertikalno izgubićemo interferencijsku sliku a samim tim i zaključke koji govore o talasnoj prirodi čestica. Ovaj eksperiment ilustruje kako koncept merenja i princip neodređenosti mogu biti iskorišćeni za obezbeđivanje logički konzistentnog opisa talasne prirode kvantnih čestica. Dodatno, eksperiment pokazuje da ako uspemo da odredimo putanju čestice, onda gubimo talasna svojstva i interferencijsku sliku. U stvari, bolje rečeno talasna svojstva kvantne čestice su uvek sakrivena. Za razliku od klasičnog elektromagnetnog talasa, talas koji opisuje kvantnu česticu ne može biti direktno posmatran. Možda bi bilo dobro i da se spomene još jedna varijacija ovog eksperimenta koju je izveo Viler 1978 godine. U ovoj varijaciji zamislimo da odluku da li ćemo da oslobodimo ili ostavimo fiksiranim ekran odložimo do trenutka kada čestica prođe proreze. Alternativno, zamislimo da neposredno pre udara čestice u ekran oslobađamo ekran da bi se moglo odrediti iz kog proreza je stigla čestica. U ovom slučaju izgleda da smo prevarili česticu i da će morati da formira interferencijsku sliku a da ipak odredimo odakle je došla. Međutim, ipak nismo dorasli prirodi ! Nekako, čestica ipak sazna za naš pokušaj prevare i uredno napravi sliku kakva bi bila i da je ekran u startu bio pokretan. Dakle nema interferencijske slike. Ovo je veoma čudna pojava jer hteli ne hteli moramo pomisliti da postoji neka čudna povezanost u obrnutom smeru od onoga na koji smo navikli. Najlogičnija pomisao je da ono što se dešava u sadašnjosti ili što se dešavalo u prošlosti utiče i na neki način određuje budućnost. Međutim ovde izgleda kao da budućnost utiče na prošlost, tj kao da naš odloženi izbor koji je definitivno budućnost za česticu koja tek kreće iz izvora ipak nekako postaje pozata čestici koja onda zna kako da se ponaša. Da li da prođe kroz obadva proreza ili samo kroz jedan. Znam da izgleda ludo ali ovaj eksperiment je toliko moćan da ne ostavlja mnogo drugih mogućnosti. Pre nego što odbacimo ovo kao nešto što je nemoguće, dobro bi se bilo pristetiti da ovde nemamo posla sa istorijom klasične čestice već da je ovo istorija kvantne čestice. Čestice o kojima je ovde reč nisu klasične čestice koje prolaze kroz jedan ili drugi prorez niti samo talasi koji prolaze kroz obadva proreza. Ovaj eksperiment je utvdio da se kvantne čestice ponašaju dvojako ali u zavisnosti od postavke eksperimenta može se utvrditi samo jedan od dva načina ponašanja.

MERENJA I NELOKALNOST

Najvažnija implikacija ove diskusije o merenjima je ta da merenjima u kvanntoj mehanici saznajemo samo ono što znamo o svetu. Na primer pošto ne možemo da precizno znamo položaj i impuls čestice, ne možemo ni precizno opisati ni svet u kome elektron ima i jedno i drugo svojstvo. U standardnoj interpretaciji kvantne mehanike precizna pozicija ili impuls čestice se mogu izmeriti ali se ne pokušava objasniti kako do ovoga dolazi. Ove osobine koje se manifestuju samo merenjima ne mogu se ograničiti samo na položaj i impuls. Ovo važi i za druge osobine kvantnih čestica koje se posmatraju. Najneverovatnija osobina kvantnih čestica je to da merenja nad jednom česticom na jednoj lokaciji izazivaju identična ponašanja druge isprepletene čestice na drugoj lokaciji. Drugim rečima, merenja mogu imati nelokalni uticaj na naše znanje o svetu. Nelokalnost kvantnomehaničkih merenja možemo najbolje ilustrovati ako uzmemo u obzir posebnu situaciju emisije dva fotona jednog pobuđenog atoma. Ovi fotoni se mogu usmeriti u suprotnim smerovima sa istom polarizacijom u smislu toga da su im spinovi (cirkularne polarizacije) usmereni na isti način. Primećeno je prilikom merenja da ako se utvrdi da foton koji je otišao levo i ima levi spin, da foton koji je otišao desno će imati isti takav spin. Kao da merenje spina fotona na jednoj strani utiče na foton na drugoj strani da zauzme isti spin. Ovakvo ponašanje ne bi bilo upadljivo da leva i desna polarizacija predstavljaju dve alternative koje nastaju prilikom generisanja fotona. Međutim to nije slučaj. U trenutku generisanja ovi fotoni su prepleteni i mogu imati i jedan i drugi spin, ali meranje ih prisiljava da zauzmu jedan definitivan spin i to uvek na način da taj spin bude isti, bez obzira na kojoj udaljenosti se nalaze. Teško je utvrditi razloge za ovakvo ponašanje fotona ali postoje kvantnomehanička objašnjenje :

- Inicijalni status čestica može biti neka vrsta superpozicije levog i desnog spina slično kao što su to istovremena čestična i talasna svojstva, pa tek merenjima čestica zauzima definitivno stanje
- Merenje ne remeti samo ono što se meri, već i dovodi u pitanje i šta se konkretno meri

Iako je u ovo veoma teško poverovati ipak ono čini deo jedne konzistentne teorije koja je potvrđena eksperimentima.

ŠREDINGEROVA JEDNAČINA

Prvi korak u razvoju logički konzistentne nerelativističke teorije kvantne mehanike je da se razvije talasna jednačina koja može da opiše prikriven talasni oblik kvantne čestice. Nju je prvi uspeo da razvije Ervin Šredinger. Uloga Šredingerove jednačine u kvantnoj mehanici je analogna ulozi Njutnovih zakona u klasičnoj mehanici. Pre nego se posvetimo Šredingerovoj jednačini, bilo bi korisno se podsetiti matematičkih alata koji opisuju talasno kretanje.

Najelegantniji talas je sinusoidalni putujući talas sa konačnom talasnom dužinom λ i periodom τ ili ekvivalentnim talasnim brojem $k = 2\pi/\lambda$ i ugaonom frekvencijom $\omega = 2\pi/\tau$. Takav talas se može opisati matematičkom funkcijom :

$$\Psi(x,t) = A\cos(kx - \omega t) \quad (13.23)$$

, gde je A konstanta. Za svaku tačku x, funkcija $\Psi(x,t)$ osciluje sa amplitudom A i periodom $2\pi/\omega$. Za svako vreme t, funkcija se talasa sa amplitudom A i talasnom dužinom $2\pi/k$. Štaviše, ovi talasi se kreću poput Meksičkog talasa, tj x se povećava sa brzinom. Na primer maksimum funkcije $\Psi(x,t)$ odgovara uslovu $kx - \omega t = 0$, što se dešava na poziciji $x = \lambda/2 + \omega t/k$, i u obadva slučaja se položaj menja brzinom ω/k. Funkcija $\sin(kx - \omega t)$ je slična sa $\cos(kx - \omega t)$ i takođe predstavlja sinusoidalni talas sa talasnim brojem k i ugaonom frekvencijom ω. Pošto vredi :

$$\sin(kx - \omega t) = \cos(kx - \omega t - \pi/2)$$

, talasanje i oscilacije su u raskoraku. Za ove talase kažemo da su fazno razmaknuti za $\pi/2$. Najopštiji sinusoidalni putujući talas, talasnog broja k i frekvencije ω je :

$$\Psi(x,t) = \mathrm{A}\cos(kx - \omega t) + B\sin(kx - \omega t) \quad (13.24)$$

, gde su A i B proizvoljne konstante. Veoma često u klasičnoj fizici i redovno u kvantnoj mehanici se ovi talasi predstavljaju u eksponencijalnom obliku :

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} \quad (13.25)$$

Predstavljanje talasne jednačine u eksponencijalnom obliku je samo matematička pogodnost. Na primer, pritisak zvučnog talasa se može opisati realnom funkcijom $\mathrm{A}\cos(kx - \omega t)$ ali ova funkcija može biti predstavljena i kao relani deo kompleksne funkcije $Ae^{i(kx-\omega t)}$ pošto je :

$$e^{i(kx-\omega t)} = \cos(kx - \omega t) + i\sin(kx - \omega t)$$

Međutim, upotreba kompleksnih funkcija u kvantnoj mehanici je nužna što ćemo videti jer imaginarni deo obezbeđuje recimo prirodni opis de Broljovog talasa. Dva sinusoidalna talasa koji se kreću u suprotnim pravcima mogu da formiraju stojeći talas. Na primer, linearna kombinacija :

$$\mathrm{A}\cos(kx - \omega t) + \mathrm{A}\cos(kx + \omega t)$$

, dovodi do talasa $2A\cos kx\cos\omega t$. Ovaj talas oscilira sa periodom $2\pi/\omega$ i sa talasnom dužinom $2\pi/k$, ali se ove oscilacije i talasanja ne propagiraju, to nije Meksički talas koji samo stoji i talasa. Dodatno, mnogi sinusoidalni talasi se mogu kombinovati i stvarati grupni talas. Na primer, matematička forma grupnog talasa formiranog od sinusoidalnih talasa konstantne amplitude A i talasnih brojeva iz opsega $k - \Delta k\ i\ k + \Delta k$ je :

$$\Psi(x,t) = \int_{k-\Delta k}^{k+\Delta k} A\cos(k'x - \omega' t)\,dk' \quad (13.26)$$

Ako je k pozitivno, ovaj grupni talas će putovati u pravcu x ose i obratno ako je k negativno putovaće u suprotnom smeru. Inicijalni oblik grupnog talasa, tj oblik za t=0, može se dobiti rešavanjem integrala :

$$\Psi(x,0) = \int_{k-\Delta k}^{k+\Delta k} A\cos k'x\,dk' \quad (13.27)$$

Odavde se dobija :

$$\Psi(x,0) = S(x)\cos kx \ , \qquad S(x) = 2A\Delta k\frac{\sin \Delta kx}{\Delta kx} \qquad (13.28)$$

Ako je $\Delta k \ll k$ imaćemo brzo promenjivi sinusoidal, $\cos kx$, sa amplitudom modulisanom sporopromenjivom funkcijom S(x), koja ima maksimum za x=0, i minimum za celobrojni umnožak od $\pi/\Delta k$. Neto rezultat je grupni talas sa efektivnom dužinom od oko $2\pi/k$. Primeri grupnog talasa za različito Δk su prikazani na slici 13.08 . Napomenimo da grupni talasi, povećavaju dužinu kako se opseg talasnih brojeva smanjuje i da bi postali monohromatski talasi beskonačne dužine mora da bude $\Delta k \to 0$. Slično ponašanje je zastupljeno i kod drugih tipova grupnih talasa. Brzina prostiranja grupnih talasa, kao i moguća promena oblika koji se propagira zavisi od odnosa ugaone frekvencije i talasnog broja. Ova relacija, tj funkcija $\omega(k)$ se naziva disperziona relacija zato što određuje kada je funkcija disperzivna a kada nije.

Disperzivni i nedisperzivni talasi

Najpoznatiji primer nedisperzionog talasa je eketromagnetni talas u vakuumu. Nedisperzivni talasi imaju disperzivnu realciju o obliku $\omega = ck$, gde je c konstanta, tako da je brzina sinusoidalnog talasa, $\omega/k = c$, je nezavisna od talasnog broja k. Grupni talas formiran od linearne superpozicije takvih sinusoidalnih talasa putuje bez promene oblika zato što svaka sinusoidalna komponenta ima istu brzinu. Nedisperzivni talasi se opisuju parcijalnom diferencijalnom jednačinom koju zovemo klasična talasna jednačina. Za talase koji se prostiru kroz tri dimenzije ona ima oblik :

$$\nabla^2\Psi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0 \qquad (13.29)$$

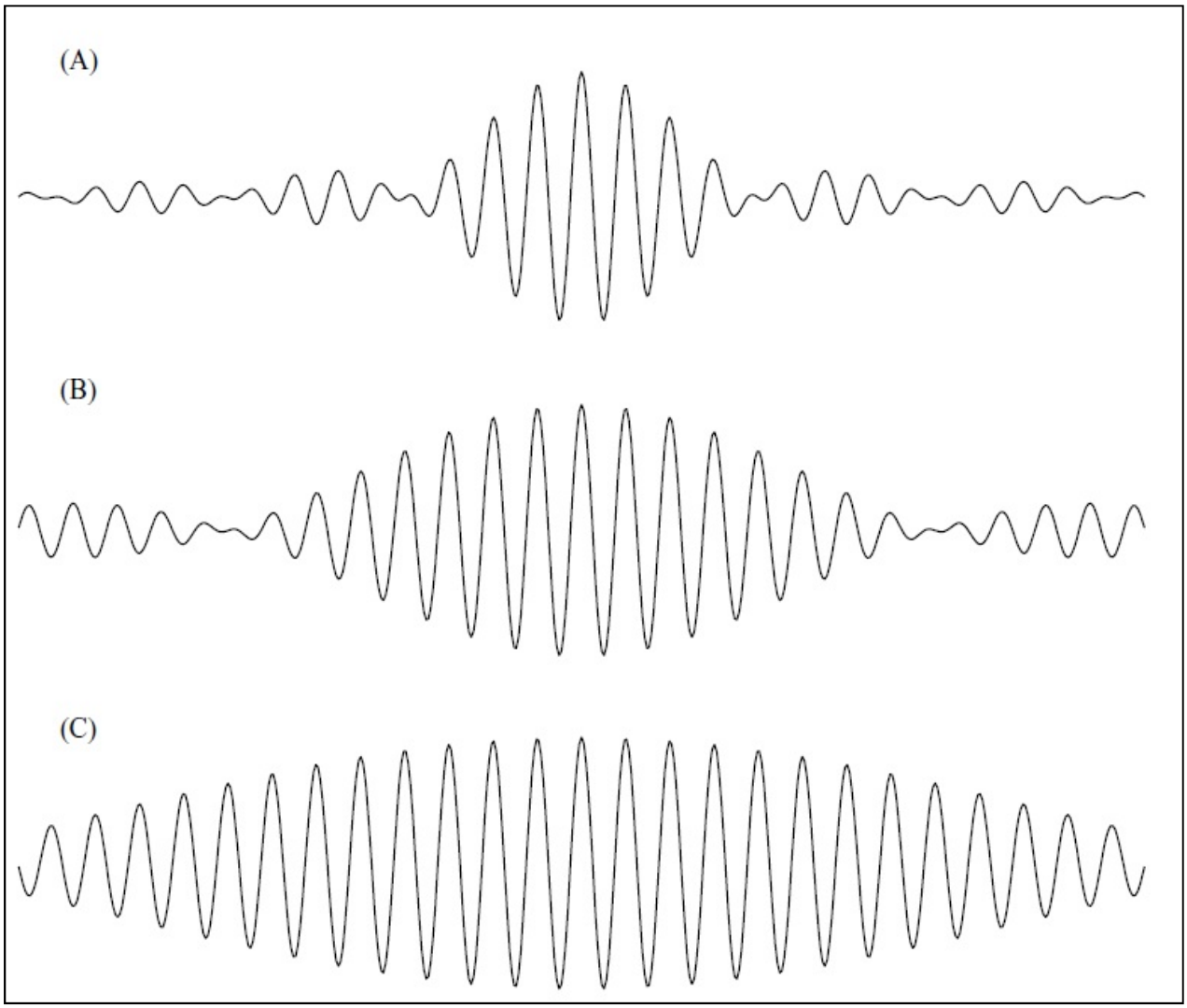
, gde je $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, pa za talase koji se kreću u pravcu samo jedne ose, recimo x ose imamo :

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0 \qquad (13.30)$$

Klasična talasna jednačina ima beskonačan broj rešenja koja odgovaraju beskonačnim varijacijama talasnih formi. Na primer, sinusoidalni talasi :

$$A\cos(kx - \omega t) \ , \qquad A\sin(kx - \omega t) \ , \quad Ae^{i(kx-\omega t)}$$

, su rešenja pod uslovom $\omega^2 = c^2k^2$, što se može videti direktnom zamenom u (13.30). Situacija za $k = +\omega/c$ odgovara talasu koji se kreće u pravcu x ose dok za $k = -\omega/c$ imamo talas koji se kreće u smeru suprotnom od smera x ose. Pošto je svaki član u klasičnoj jednačini talasa linearan, linearna superpozicija talasa je takođe jedno od rešenja.



Slika 13.08. Inicijalni oblici grupe talasa. Slika pokazuje povećanje dužine talasa sa smanjenjem Δk.

Međutim većina talasa na koje nailazimo u klasičnoj i kvantnoj fizici su disperzivni talasi. Disperzivni talasi se opisuju parcijalnom diferencijalnom jednačinom koja je mnogo komplikovanija od (13.29). Disperzivna relacija je komplikovanija od $\omega = ck$, tako da brzina prostiranja sinusoidalnog talasa ω/k, više zavisi od talasnog broja k. Otuda sledi da će grupni disperzivni talas menjati oblik prilikom propagacije. Međutim, ako je grupni talas sastavljen od talasa koji imaju uzak opseg talasnih brojeva oni imaju dobro definisanu brzinu širenja. Ova brzina se naziva grupna brzina i definisana je sa :

$$v_{gr} = \frac{d\omega}{dk} \quad (13.31)$$

, dok se brzina jednostavnog sinusoidalnog talasa ω/k naziva fazna brzina. Da bismo razumeli jednačinu (13.31) napomenimo da grupna brzina opisuje kretanje lokalnog poremećaja zbog konstruktivne interferencije mnogih sinusoidalnih talasa. Fokusirajmo se na tačku konstruktivne interferencije dva sinusoidalna talasa talasnih brojeva k_1 i k_2 i ugaonih frekvencija ω_1 i ω_2 koji se formiraju kada su talasi u fazi :

$$k_1 x - \omega_1 t = k_2 x - \omega_2 t$$

Preuređivanjem ove jednačine dobijamo tačku konstruktivne interferencije :

$$x = \left(\frac{\omega_1 - \omega_2}{k_1 - k_2}\right) t \quad (13.32)$$

Tako je naša tačka konstruktivne interferencije nalazi na x=0 i t=0, i kreće se brzinom $(\omega_1 - \omega_2)/k_1 - k_2$ ili prema (13.31) ako je $|k_1 - k_2|$ dovoljno malo. Naravno sa dva sinusoidalna talasa postoji konačan broj tačaka konstruktivne interferencije, ali mnogo sinusoidalnih talasa mogu formirati lokalni region konstruktivne interferencije koji se kreće brzinom v_{gr}. Da bi ilustrovali kako se može izračunati grupna brzina, razmotrimo primer vodenih talasa sa veoma dugim talasnim dužinama, koje poštuju disperzionu relaciju :

$$\omega = \sqrt{gk} \quad (13.33)$$

, gd je g gravitaciono ubrzanje. Brzina sinusoidalnog vodenog talasa ili takozvana fazna brzina je :

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{g}{k}} \quad (13.34)$$

, a brzina grupnih vodenih talasa sa sa uskim opsegom talasnih brojeva k je :

$$v_{gr} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{g}{k}} \quad (13.35)$$

Dakle za vodeni talas grupna brzina je jednaka tačno polovini fazne brzine. S druge strane sinusoidalni talasi koji formiraju grupni putuju dvostrukom brzinom regiona maksimalnog poremećaja formiranog usled mešanja ovih talasa. Međutim, oblik poremećaja će se menjati kroz prostiranje talasa.

TALASNA JEDNAČINA ČESTICA

U klasičnoj fizici, fundamentalni zakoni fizike se koriste da se izvedu talasne jednačine koje opisuju talasnu prirodu fenomena. Na primer Maksvelove jednačine elektromagnetizma se korsite da se izvede klasična talasna jednačina koja opisuje elektromagnetne talase u vakuumu. Nasuprot tome videćemo da talasne jednačine koje opisuju česticu se ne mogu izvesti iz osnovnih fizičkih principa. U kvantnoj mehanici možemo samo da pogađamo oblik talasne jednačine i da je onda kroz eksperimente potvrđuju. Ovde ćemo da pokušamo da izgradimo moguću talasnu jednačinu slobodnog kretanja nerelativističkih čestica razmatranjem svojstava de Broljovog talasa koji opisuju česticu. Prema jednačini (13.1) čestica sa impulsom p ima de Broljovu talasnu dužinu datu sa $\lambda = h/p$. Ovo implicira da de Broljov talas sa talasnim brojem $k = 2\pi/\lambda$ opisuje česticu sa impulsom :

$$p = \hbar k \quad (13.36)$$

Mi ćemo da proširimo ovu ideju sa de Broljovom grupom talasa, koji imaju opseg talasnih brojeva između $k - \Delta k$ i $k + \Delta k$ koji opisuju čestice sa neodređenim impulsom :

$$\Delta p \approx \hbar \Delta k \quad (13.37)$$

Takođe ćemo pretpostaviti da je dužina ove grupe talasa mera od Δx - neodređenosti položaja čestice. Koristeći jednačinu (13.28) i sliku 13.08 kao vodič, možemo pisati :

$$\Delta x \approx \frac{2\pi}{\Delta k} \quad (13.38)$$

Množenjem dobijamo :

$$\Delta x \Delta p \approx h$$

, što se slaže sa Hajzenbergovim principom neodređenosti. Dakle de Broljova grupnog talasa može pridoneti neodređenosti u poziciji i impulsu kvantne čestice. Međutim, moramo da primetimo da de Broljov talas mora biti transformisan merenjima. Ako se napravi precizno merenje položaja talasa, novoformirani talas koji opisuje česticu mora biti veoma kratak, superpozicija sinusoidalnih talasa sa veoma širokim spektrom talasnih dužina. Slično tome ako se napravi precizno merenje impulsa, novi talas mora biti veoma dugačak sa jasno definisanim talasnim dužinama. Ovo znači da je grupni talas krhak entitet koga transformišu merenja. Niko ne zna kako se to dešava. Sada pretpostavimo da grupni talas predstavljaju kvantne čestice. Konkretno zahtevamo da grupna brzina ovog grupnog talasa bude jednaka brzini čestica mase m i impulsa $p = \hbar k$, tj zahtevamo da je :

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} \quad (13.39)$$

Ovu jednačinu možemo da integralimo da dobijemo odnos disperzione relacije de Broljovih talasa sastavljenih od slobodnih kvantnih čestica mase m.

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (13.40)$$

Za dobijanje ove relacije smo konstantu integracije postavili na nula jer ona dovodi do neopservabilnih posledica u nerelativističkoj kvantnoj mehanici. Naš zadatak je da nađemo jednačinu talasa koja ima sinusoidalno rešenje koje zadovoljava disperzionu relaciju. Najjednostavnija talasna jednačina te vrste je Šredingerova jednačina. Za slobodnu česticu koja se kreće u jednoj dimenziji ona ima oblik :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad (13.41)$$

Lako se uveriti da kompleksna eksponencijalna funkcija :

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} \quad (13.42)$$

, je rešenje ove jednačine pod uslovom da ω i k zadovoljavaju relaciju (13.40). Ubacivanjem ove funkcije u (13.41) dobijamo za levu stranu jednačine dobijamo :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar(-i\omega)Ae^{i(kx-\omega t)} = \hbar\omega Ae^{i(kx-\omega t)}$$

, a za desnu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}Ae^{i(kx-\omega t)}$$

I imamo rešenje koje obezbeđuje da je $\hbar\omega=\hbar^2k^2/2m$. Pošto sinusoidalno rešenje opisuje kretanje talasa u smeru x ose, sa talasnim brojem k i ugaonom frekvencijom ω, pretpostavićemo da ono reprezentuje slobodnu česticu koja se kreće x osom, sa oštro definisanim impulsom $p=\hbar k$ i energijom $E=p^2/2m=\hbar\omega$. Postoji naravno još mnogo rešenja Šredingerove jednačine koja reprezentuju stanje kretanja čestica. Treba naglasiti da smo u cilju prilagođavanja disperzione relacije de Broljovih talasa, stigli do talasne jenačine, Šredingerove jednačine za slobodne čestice, čija su rešenja nužno složene funkcije prostora i vremena. Ove složene funkcije se zovu talasne funkcije. Ranije smo govorili o predstavama ovih funkcija u kompleksnom obliku i o tome kako za klasične talase važi da du oni funkcija prostora i vremena. S druge strane Šredingerove jednačine nisu realne funkcije prostora i vremena. Do sada smo razmatrali samo sinusoidalna rešenja Šredingerove jednačine, ali imajući u vidu ova rešenja možemo konstruisati i druge vrste rešenja. Pošto je svak član Šredingerove jednačine linearan superpozicija rešenja je takođe rešenje. Na primer :

$$\Psi(x,t)=A_1e^{i(k_1x-\omega_1t)}+A_2e^{i(k_2x-\omega_2t)}\quad(13.43)$$

, gde je :

$$\hbar\omega_1=\hbar^2{k_1}^2/2m\ \ i\ \hbar\omega_2=\hbar^2{k_2}^2/2m$$

, i gde su $A_1\ i\ A_2$ su proizvoljne kompleksne konstante, je rešenje Šredingerove jednačine što se lako može potvrditi direktnom zamenom u jednačinu (13.41). Zaista najopštije rešenje je superpozicija sinusoidalnih talasa sa svim mogućim ugaonim frekvencijama i talasnim brojevima :

$$\Psi(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}A(k')e^{i(k'x-\omega't)}\,dk',sa\ \hbar\omega'=\frac{\hbar^2k'^2}{2m}\qquad(13.44)$$

U ovoj superpoziciji $A(k')$ je proizvoljna kompleksna funkcija a integral reprezentuje sumu svih mogućih vrednosti k'. Ako je funkcija $A(k')$ takva da obuhvata uzak spektar talasnih brojeva oko pozizivne vrednosti k, ova superpozicija daje grupni talas koji se kreće u pozitivnom smeru x ose grupnom brzinom $\hbar k/m$. Takav grupni talas reprezentuje kvantne čestice koje se kreću brzinom $\hbar k/m$, ali sa pozicijom i momentom koji je u skladu sa Hajzenbergovim principom neodređenosti.

TALASNA JEDNAČINA ČESTICA U POTENCIJALNOM ENERGETSKOM POLJU

Interakcije nerelativističkih čestica često se mogu opisati preko potencijalne energije polja. Na primer, za elektron u atomu vodonika možemo smatrati da se kreće u potencijalnom energetskom polju jezgra :

$$V(r)=\frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0r}$$

U klasičnoj mehanici, ovo polje podrazumeva da je elektron na udaljenosti r od jezgra atoma izložen dejstvu privlačne sile veličine $e^2/4\pi\varepsilon_0 r^2$. U kvantnoj mehanici ovo znači da talasna jednačina za elektron nije tako jednostavna kao za slobodnu česticu. Ervin Šredinger je 1926 godine pronašao talasnu jednačinu za kvantne čestice u potencijalnom energetskom polju koja vodi do uspešnog opisa atoma i ostalog mikroskopskog sveta. Šredingerova jednačina za česticu koja se kreće u trodimenzionalnom energetskom polju potencijalne energije $V(r)$ je :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\Psi \qquad (13.45)$$

Kada se čestica kreće u jednodimenzionalnom potencijalnom polju V(x), jednačina dobija jednostavniji oblik :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\Psi \qquad (13.46)$$

Ako je V(x) konstantno, lako je naći rešenje ove jednačine. Na primer kada se čestica kreće duž x ose u konstantnom potencijalnom polju V_0, talasna funkcija :

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

, je rešenje jednačine (13.46) pod pretpostavkom da je :

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0$$

Ova talasna funkcija predstavlja česticu sa strogo definisanom energijom E i impulsom p, datim sa :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V_0 \; i \; p = \hbar k$$

Kasnije ćemo da pronađemo rešenje i za promenjivo polje, uključujući i veoma bitan slučaj Kolombovog potencijala elektrona u atomu. Međutim sada je najvažnije da se razume Šredingerova jednačina.

Impuls i pozicija

Šredingerova jednačina daje beskrajan broj rešenja koja odgovaraju beskonačnom broju mogućih stanja kretanja čestice. Ove talasne funkcije postaju proširive i nelokalne pa time mogu da objasne talasna svojstva čestice, ali treba odrediti i čestična svojstva. U eksperimentu sa dva proreza, na primer, talasna funkcija opisuje kako elektron može proći kroz obadva proreza, ali kako da objasni da se na ekranu taj elektron prikaže kao piksel. Ovaj roblem može biti rešen usvajanjem radikalne ideje da merenja dovode do nasumičnih ishoda vođenih zakonima verovatnoće.

Imajući u vidu važnost verovatnoće u kvantnim merenjima, ukratko ćemo da se podsetimo kako su diskretne i kontinualne nasumične promenjive regulisane verovatnoćama raspodele. Ako zamislimo eksperiment čije izlaze vrednosti su dikretne nasumične varijable koje mogu da imaju vrednosti

$x_0, x_1, x_2, \ldots$ sa verovatnoćama $p_0, p_1, p_2 \ldots$. Skup p_n verovatnoća se naziva raspodela verovatnoće. Pošto je ukupna verovatnoća svih mogućih događaja jednaka jedinici, raspodela verovatnoće mora zadovoljavati uslov normalizacije :

$$\sum_n p_n = 1 \qquad (13.47)$$

Raspodelu verovatnoće p_n možemo koristiti da procenimo očekivanu vrednost nasumične promenjive x_n. To je prosečna vrednost mnogo mogućih ishoda koji se mogu desiti kada se proces ponavlja beskonačan broj puta. Ova vrednost je data sa :

$$\langle x \rangle = \sum_n x_n p_n \qquad (13.48)$$

Verovatnoća rasprostranjenosti ishoda oko očekivane vrednosti daje standardnu devijaciju ili neizvesnost za x. Koren standardne devijacije zovemo varijansa i onda je data sa :

$$(\Delta x)^2 = \sum_n (x_n - \langle x \rangle)^2 \, p_n \qquad (13.49)$$

U ovom izrazu, $(x_n - \langle x \rangle)$ je devijacija za x_n od očekvane vrednosti, a može biti veća ili jednaka nuli a njena prosečna vrenost je nula. Međutim, varijansa je prosek kvadrata ove devijacije što znači da je jednaka nuli kada postoji samo jedan mogući ishod i veća od nule ako postoji više različitih ishoda. U mnogim slučajevima korisno je gornju jednačinu napisati u obliku :

$$(\Delta x)^2 = \sum_n x_n^2 p_n - 2\langle x \rangle \sum_n x_n p_n + \langle x \rangle^2 \sum_n p_n$$

Prvi član sa desne strane je jednak $\langle x^2 \rangle$, očekivana vrednost kvadrata za x_n, drugi član je $-2\langle x \rangle \langle x \rangle = -2\langle x \rangle^2$, a treći $\langle x \rangle^2$, što u konačnom zbiru daje :

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \qquad (13.50)$$

Dakle ova jednačina pokazuje da je varijansa jednaka razlici proseka kvadrata i kvadrata proseka slučajne promenjive.

KONTINUALNA SLUČAJNA PROMENJIVA

Razmotrimo sada slučaj kada se rezultati ili ishodi nekog eksperimenta mogu predstaviti kontinualnom promenjivom x. Verovatnoću ishoda između x i x+dx možemo označiti sa $\rho(x)dx$. Funkcija $\rho(x)$ se naziva raspodela verovatnoće i mora da zadovoljava uslov :

$$\int_x \rho(x) dx = 1 \qquad (13.51)$$

Na primer ako je pozicija čestice ograničena na oblast od 0 do a vredi :

$$\int_0^a \rho(x)dx = 1$$

Očekivana vrednost za x je analogno (13.48) data sa :

$$\langle x \rangle = \int_x x\rho(x)\, dx \quad (13.52)$$

Slično očekivana vrednost od x^2 je :

$$\langle x^2 \rangle = \int_x x^2\rho(x)dx \quad (13.53)$$

, a standardna devijacija ili neodređenost je data sa :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (13.54)$$

VEROVATNOĆA POLOŽAJA

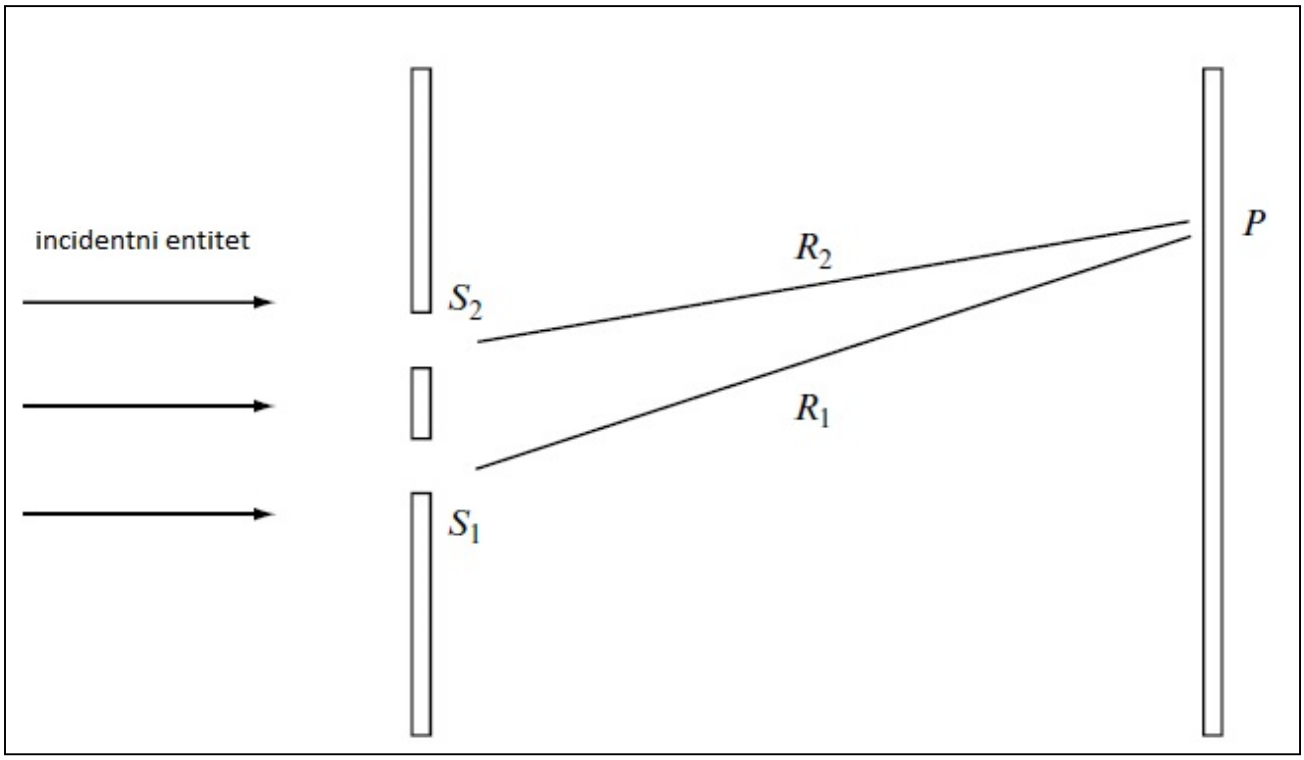
Sada se vraćamo na kvantnu mehaniku gde ćemo da razmotrimo kako se položaj kvantne čestice može može opisati pomoću verovatnoće. Ovaj problem je prvi rešio Maks Born uvodeći novu interpretaciju Šredingerove jednačine što je dovelo do revolucije u filozofskoj osnovi fizike. Da bi predočili njegovu interpretaciju moramo da se vatimo eksperimentu sa dva proreza. Prvo ćemo da vidimo kako se interferencijska slika dobija kada klasični talas prolazi kroz proreze, a onda na sličan način kako se ona dobija iz toka kvantnih čestica.

Kada klasični talas prolazi kroz proreze on se na izlazu iz proreza pojavljuje kao dva talasa koji se superponiraju i na ekranu stvaraju dobro poznatu interferencijsku sliku. Ovi talasi mogu biti opisani realnom funkcijom prostora i vremena. Na primer ako imamo da je talasni broj k, ugaona frekvencija ω, kombinacija talasa u tački P (slika 13.09), na udaljenosti R_1 od proreza S_1 i R_2 od proreza S_2 možemo pisati :

$$\Psi = A_1 \cos(kR_1 - \omega t) + A_2 \cos(kR_2 - \omega t)$$

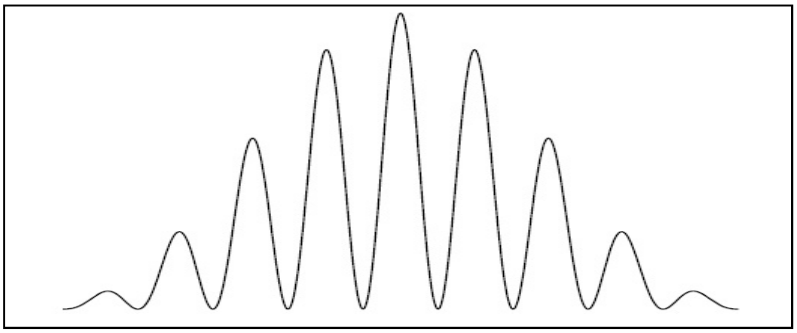
, gde su A_1 i A_2 amplitude koje su inverzno proporcionalne sa R_1 i R_2 respektivno. Gustina energije i intezitet talasa u tački P su roporcionalni kvadratu talasa. Ako pretpostavimo da je $A_1 = A_2 = A$, što je dobra aproksimacija kada su udaljenosti R_1 i R_2 velike u odnosu na razmak između proreza i uz korišćenje jednostavne trigonometrije dobijamo :

$$\Psi^2 = 2A^2 \cos^2\left(\frac{k(R_1 - R_2)}{2}\right)\cos^2 \omega t \quad (13.55)$$



Slika 13.09. Eksperiment sa dva proreza

Iz ovoga sledi da intezitet ima maksimum kada je $k(R_1 - R_2)/2$ clobrojni umnožak od π i minimum kada je celobrojni umnožak od $\pi/2$. Ako k izrazimo preko talasne dužine videćemo da se maksimum pojavljuje kada je razlika putanja $R_1 - R_2$ jednaka celobrojnom umnošku od talasne dužine odnosno minimum kada je ovo jednako umnošku polovine talasne dužine. Kada se uzmu u obzir konačne dimenzije proreza ovi maksimumi i minimumi daju interferencijsku sliku koju vidimo na slici 13.10.



Slika 13.10. Interferencijski patern dobijen iz eksperimenta sa dva proreza

Sada da pokušamo da na sličan način opišemo kako se ova slika stvara kada se radi o toku kvantnih čestica. Pretpostavimo da je tajni prolaz čestica kroz obadva proreza reprezentovan talasnom funkcijom, tj preko kompleksne funkcije prostora i vremena koja je rešenje Šredingerove jednačine. Ako čestica ima određen impuls $p = \hbar k$ i energiju $E = \hbar\omega$, talasna funkcija u tački P je superpozicija dva člana, talasa iz S_1 i S_2 :

$$\Psi = A_1 e^{+i(kR_1 - \omega t)} + A_2 e^{i(kR_2 - \omega t)} \qquad (13.56)$$

, gde su A_1 i A_2 kompleksne konstante sa aproksimativno istom vrednošću. Kada čestica dolazi do ekrana dešava se veoma komplikovan proces. U svakoj tački na ekranu se nalazi merni uređaj koji uveličava efekte dolaska čestice, tako da je u svakom trenutku jasno da li je čestica došla ili ne. U praksi čestica se može

otkriti u bilo kojoj tački na ekranu i kako sve više i više čestica prispeva na ekran formira se dobro poznata interferencijska slika. Nećemo da pokušavamo shvatiti kako se ovaj komplikovan proces odigrava. Umesto toga postavićemo skromniji cilj, koji opisuje moguće ishode procesa koristeći Šredingerovu talasnu funkciju Ψ. To se može postići tako što ćemo uvesti smelu pretpostavku da je verovatnoća otkrivanja čestice na određenoj lokaciji srazmerna efektivnoj vednosti inteziteta kompleksne talasne funkcije na toj lokaciji. Analogno klasičnoj teoriji definisaćemo ovaj intezitet da bude realan broj dat sa :

$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi \quad (13.57)$$

Vrednost za $|\Psi|^2$ u tački P na ekranu se može naći koristeći talasnu funkciju (13.56). Praveći aproksimaciju $A_1 = A_2 = A$, imamo :

$$|\Psi|^2 = \left(A^* e^{-i(kR_1-\omega t)} + A^* e^{-i(kR_2-\omega t)}\right)\left(A e^{-i(kR_1-\omega t)} + A e^{-i(kR_2-\omega t)}\right)$$

, što daje :

$$|\Psi|^2 = |A|^2 + |A|^2 + |A|^2 e^{ik(R_1-R_2)} + |A|^2 e^{-ik(R_1-R_2)}$$

Koristeći matematičke relacije :

$$\cos\theta = \frac{\left(e^{+i\theta} + e^{-i\theta}\right)}{2} \quad , \quad \cos\theta = 2\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - 1$$

, dolazimo do :

$$|\Psi|^2 = 2A^2 \cos^2\left(\frac{k(R_1 - R_2)}{2}\right) \qquad (13.58)$$

Ako ovo uporedimo sa (13.55) vidimo da $|\Psi|^2$ ima maksimalne i minimalne vrednosti slične onima kod klasičnih talasa, tj maksimm postoji kada je $R_1 - R_2$ celobrojni umnožak de Broljove talasne dužine odnosno, minimum kada je $R_1 - R_2$ celobrojni umnožak polovine de Broljove talasne dužine. Dakle, ako je verovatnoća detekcije proporcionalna sa $|\Psi|^2$, na ekranu će se pojaviti interferencijska slika slična kao i kod klasičnih talasa. Dakle imamo logički način za opis interferencijske slike koju stvaraju kvantne čestice. On je baziran na dve ključne ideje. Prvo, talasna funkcija čestica na ekranu, Ψ, je linearna superpozicija talasnih funkcija, talasa iz S_1 i iz S_2. Drugo, verovatnoća detekcije čestice na nekoj lokaciji je proporcionalna sa $|\Psi|^2$ na toj lokaciji. Još treba da uspešno objasnimo ono što se dešava u modifikovanom eksperimentu sa dva proreza. U suštini treba objasniti zašto nema interferencijske slike kada identifikujemo iz kog proreza dolaze čestice. Da bismo to uradili pretpostavićemo da proces identifiacije menja talasnu funkciju čestice tako da ona postaje jedan talas iz proreza kroz koji prolazi čestica. Na taj način pratimo standardnu praksu, pod uslovom da merenje stvarno utiče na talasnu funkciju. Takođe je standardna praksa da se ne ide u istraživanjima preduboko.

Bornova interpretacija

Ideju da talasnom funkcijom vladaju potencijalni ishodi u merenju položaja prvi je predložio Maks Born 1926 godine. Ovo se sada zove Bornova interpretacija talasne funkcije. Prema toj interpretaciji talasna

funkcija $\Psi(r,t)$ je kompleksna funkcija prostornih koordinata, čiji kvadrat $|\Psi(r,t)|^2$ je mera verovatnoće pronalaženja čestice u tački r u trenutku t. Čestica može biti pronađena bilo gde ali je najverovatnije da će biti pronađena u tački gde je $|\Psi(r,t)|^2$ najveća. Važi :

$$|\Psi(r,t)|^2 d^3r = \begin{cases} verovatnoća\ pronalaska\ čestice \\ u\ trenutku\ t\ u\ elementu\ zapremine\ d^3r \end{cases} \qquad (13.59)$$

Dakle $|\Psi(r,t)|^2$ možemo posmatrati kao gustinu verovatnoće za poziciju. Zbog toga se talasna funkcija $\Psi(r,t)$ često naziva verovatnoća amplitude u poziciji. Ako integralimo gustinu verovatnoće na svim pozicijama dobijamo verovatnoću pronalaska čestice bilo gde u univerzumu. Pošto se čestica definitivno mora nalaziti negde zbir ovih verovatnoća mora biti jednak jedinici. Dakle talasna funkcija mora zadovoljavati uslov normalizacije :

$$\int |\Psi(r,t)|^2\, d^3r = 1 \qquad (13.60)$$

Ova jenačina izgleda manje strašna kada kretanje čestice ograničimo na jednu dimenziju. Ako se čestica kreće duž x ose, ona može biti opisana talasnom funkcijom $\Psi(x,t)$ na sledeći način :

$$|\Psi(x,t)|^2 dx = \begin{cases} verovatnoća\ pronalaska\ čestice\ u \\ trenutku\ t\ između\ x\ i\ x+dx \end{cases} \qquad (13.61)$$

Pošto se čestica mora nalaziti negde između $x = -\infty\ i\ x = +\infty$ talasna funkcija mora zadovoljavati uslov normalizacije :

$$\int |\Psi(x,t)|^2\, dx = 1 \qquad (13.62)$$

U praksi, talasna funkcija se normalizuje množenjem rešenja Šredingerove jednačine sa odgovarajućom konstantnom. Treba naglasiti da se ovo pronalaženje oslanja na šematski opis pozicije merenja, u kome je mali događaj pojačan kao da se čestica materijalizuje na određenoj lokaciji sa verovatnoćom proporcionalnom $|\Psi|^2$. Ova šematska merenja dovode na kraju do moćne teorije iako se ne zalazi u objašnjenja kako se stvari odvijaju. Izgleda da je kvantna mehanika zato toliko i uspešna.

VEROVATNOĆA IMPULSA

Sada čemo da pokažemo kako se impuls čestice može opisati Šredingerovom talasnom funkcijom. Ako talasna funkcija može predstaviti česticu kroz skup mogućih pozicija, za očekivati je i da je može redstaviti preko opsega potencijalnih impulsa. Na primer talasna funkcija :

$$\Psi(x,t) = A_1 e^{+i(k_1 x - \omega t)} + A_2 e^{-i(k_2 x - \omega t)}$$

, može opisati slobodnu česticu koja se kreće duž x ose, sa dva moguća impulsa i energije

$$p_1 = \hbar k_1, E_1 = \hbar\omega_1 \ \ i \ \ p_2 = \hbar k_2, E_2 = \hbar\omega_2$$

Ova ideja je takođe ilustrovana preko opšteg rešenja Šredingerove jednačine za slobodnu česticu koje je dato na sledeći način :

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i(kx-\omega t)}\, dk, \quad za\ \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (13.63)$$

U talasu imamo superponirane sinusoidalne talase, svaki sa različitim talasnim brojem k, vrednost $|A(k)|^2$ je mera inteziteta sinusoidalnog talasa, talasnog broja k. U čestičnom smislu, ovaj opseg talasnih brojeva odgovara opsegu mogućih impulsa $p = \hbar k$. Pretpostavićemo, analogno sa Bornovom interpretacijom talasne funkcije, da će se većina izmerenih impulsa korespondirati sa vrednošću $\hbar k$ za koji je $|A(k)|^2$ najveća. Uopšteno uzevši, možemo tretirati poziciju i impuls na isti način preko Furieovih transformacija. Svaka talasna funkcija za česticu koja se kreće u jednoj dimenziji ima uvek svoju Furieovu transformaciju koju možemo da napišemo u obliku :

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \widetilde{\Psi}(p,t) e^{+ipx/\hbar}\, dp \qquad (13.64)$$

Inverzna Furieova trnsformacija je :

$$\widetilde{\Psi}(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,t) e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\, dx \qquad (13.65)$$

Može se pokazati da ako je $\Psi(x,t)$ normalizovana da je i $\widetilde{\Psi}(p,t)$ takođe normalizovana. Simetrija između pozicije i impulsa i ranija tumačenja superpozicije sinusoidalnih talasa, dovodi nas do pretpostavke da $|\Psi(x,t)|^2$ je raspodela verovatnoće za pronalaženje čestice sa pozicijom x, a $\left|\widetilde{\Psi}(x,t)\right|^2$ je raspodela verovatnoće za pronalaženje čestice sa impulsom p. Dalje, pošto talasna funkcija $\Psi(x,t)$ je verovatnoća amplitude za poziciju, $\widetilde{\Psi}(p,t)$ je verovatnoća amplitude impulsa. Ova generalizacija Bornove interpretacije talasne funkcije se lako može proširiti da opiše verovatnoću impulsa za česticu koja se kreće u trodimenzionalnom prostoru.

ČESTICE U OGRANIČENOM PROSTORU

Ovde ćemo da ilustrujemo kako se raspodela verovatnoće položaja i impulsa može izračunati razmatrajući jedan jednostavan slučaj, čestica koje su ograničene u konačnom jednodimenzionalnom prostoru $0 < x < a$. Kasnije ćemo da vidimo da čestice imaju beskonačan broj stanja sa diskretnim energijama označenim kao kvantni brojevi n=1,2,3... . Čestica koja se nalazi u kvantnom stanju n ima energiju :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad k_n = \frac{n\pi}{a} \qquad (13.66)$$

, i talasnu funkciju :

$$\Psi_n(x,t) = \begin{cases} N \sin k_n x\, e^{iE_n t/\hbar} & za\ 0 < x < a \\ 0 & -\ drugde \end{cases} \qquad (13.67)$$

Konstanta N, koja se zove normalizaciona konstanta može se dobiti normalizacijom raspodele verovatnoće pozicije. Ona je data sa $|\Psi_n(x,t)|^2$, a njena vrednost je nula izvan regiona $(0,a)$ a unutar regiona je data sa :

$$|\Psi_n(x,t)|^2 = N^* \sin k_n x \, e^{+iE_n t/\hbar} N \sin k_n x \, e^{-iE_n t/\hbar} = |N|^2 \sin^2 k_n x$$

Ukupna verovatnoća pronalaženja čestice na bilo kojoj mogućoj poziciji je data normalizacionim integralom :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_n(x,t)|^2 dx = |N|^2 \int_0^a \sin^2 kx \, dx = |N|^2 \frac{a}{2}$$

Izjednačavanjem ove jednačine sa jedinicom, nalazimo da za $N = \sqrt{2/a}$ dolazimo do normalizovane raspodele verovatnoće i normalizovane talasne funkcije. Raspodela verovatnoće impulsa za česticu je data sa $\left|\widetilde{\Psi}_n(p,t)\right|^2$, gde je

$$\widetilde{\Psi}_n(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n\,(x,t) e^{-ipx/\hbar} dx$$

Ako iskoristimo jednačinu (13.67) sa $N = \sqrt{2/a}$ dobijamo :

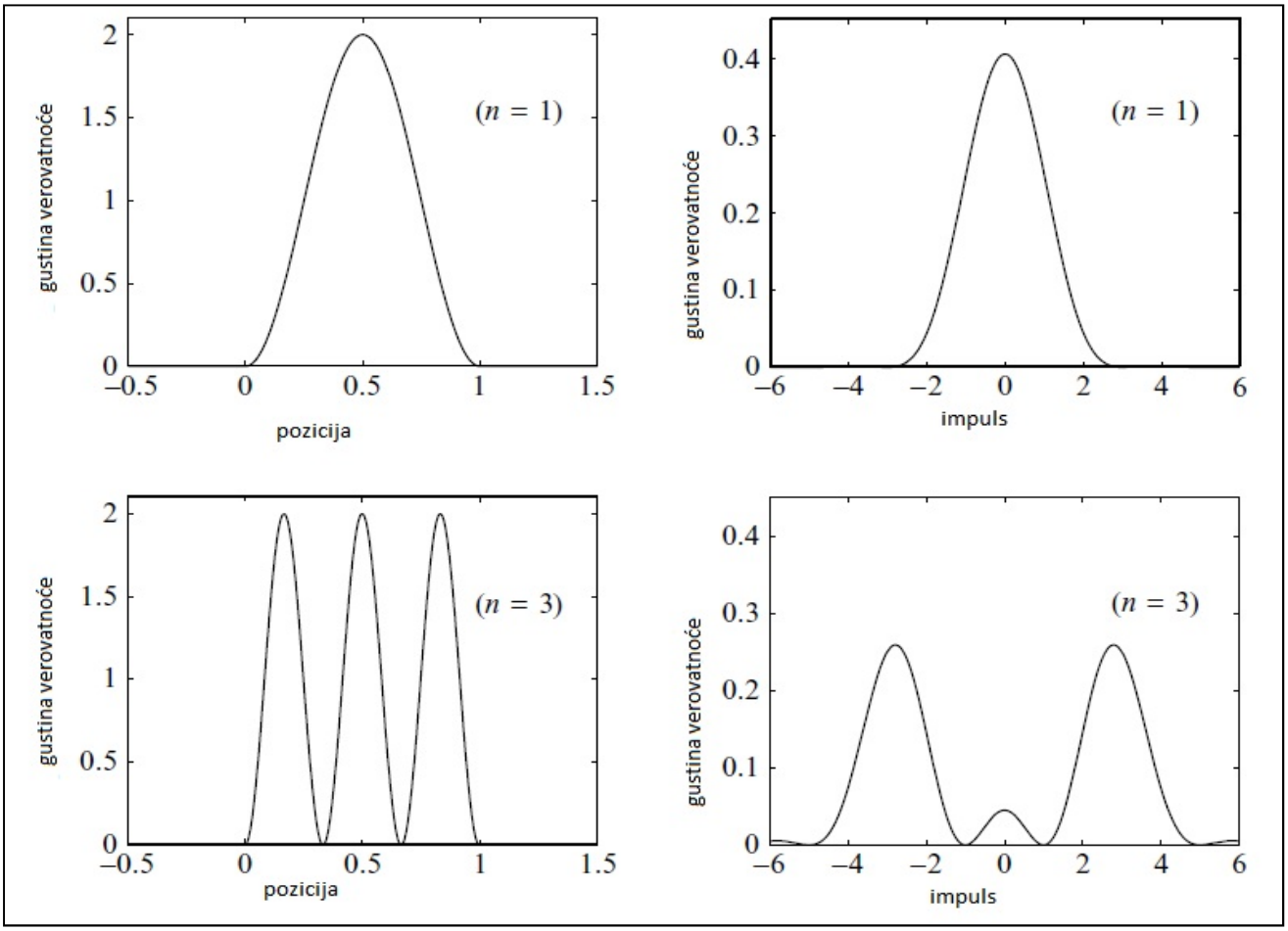
$$\widetilde{\Psi}_n(p,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}} e^{-iE_n t/\hbar} \int_0^a e^{-ipx/\hbar} \sin k_n x dx$$

, a integral se lako može proceniti ako iskoristimo jednakost :

$$\sin k_n x = \frac{e^{+ik_n x} - e^{-ik_n x}}{2i}$$

Na slici 13.11 su prikazane raspodele verovatnoće za poziciju i impuls čestica koje su ograničene prostorom $0 < x < a$. Razmatrana su dva moguća stanja, osnovno stanje sa n=1, i drugo pobuđeno stanje sa n=3.

Raspodela verovatnoće pozicije, prikazana sa leve strane slike, ukazuje na to da je najverovatnija pozicija $x = a/2$ za n=1 a kada je n=3, postoje tri najverovatnije pozicije, $x = a/6\,, a/2\,, 5a/6$.Raspodela verovatnoće impulsa prikazana sa leve strane slike ukazuje na to da maksimum impulsa se dešava za $x = 0$, za n=1 a za n=3 ima dva maksimuma na $\pm\, 3\hbar\pi/a$.



Slika 13.11 Raspodele verovatnoće položaja i impulse

OČEKIVANE VREDNOSTI

Uopšteno govoreći, ishodi merenja u kvantnoj mehanici su slučajne varijable sa mnogo mogućih vrednosti. Prosek ovih vrednosti se naziva očekivana vrednost. U načelu, očekivana vrednost se može naći uzimajući prosečan rezultat merenja u beskonačnom ansamblu identično pripremljenih sistema. Alternativno, možemo izračunati očekivanu vrednost koristeći raspodelu verovatnoće koja uređuje ishode merenja. Da bi sačuvali matematičku jednostavnost koliko god je to moguće, pretpostavićemo kretanje čestice duž x ose. Rezultat merenja pozicije na x osi je kontinualna slučajna varijabla. Talasna funkcija $\Psi(x,t)$ je verovatnoća amplitude za posmatranu poziciju, a $|\Psi(x,t)|^2$ je verovatnoća pronalaženja čestice u opsegu $x, x+dx$ u trenutku t. Dakle, ako se merenje pozicije ponavlja mnogo puta na identičan način, na istoj čestici pod istim okolnostima, moguće je mnogo različitih ishoda pa je očekivana vednost ovih ishoda :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\Psi(\mathrm{x},\mathrm{t})|^2 \mathrm{dx} \qquad (13.68)$$

Na sličan način, izmereni impulsi čestice predstavljaju kontinualnu slučajnu promenjivu. Furieova transformacija talasne funkcije, $\widetilde{\Psi}(p,t)$, je verovatnoća amplitude posmatranog impulsa, a $\left|\widetilde{\Psi}(p,t)\right|^2 dp$ je daće impuls imati ishod između p i p+dp u trenutku t. Dakle očekivana vrednost za impuls je :

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p\left|\widetilde{\Psi}(p,t)\right|^2 dp \qquad (13.69)$$

Imajući u vidu da je $|\Psi|^2 = \Psi * \Psi$ i $\left|\widetilde{\Psi}\right|^2 = \widetilde{\Psi} * \widetilde{\Psi}$, poslednja dva integrala možemo napisati u formi :

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\mathrm{x,t})\mathrm{x}\Psi(\mathrm{x,t})\mathrm{dx} \qquad (13.70)$$

, i

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \widetilde{\Psi}^*(p,t)p\widetilde{\Psi}(p,t)dp \qquad (13.71)$$

Ova očekivanja i Furieov transformacioni integral iz jednačina (13.65) i (13.65) ilustruju simetriju između položaja i impulsa u kvantnoj mehanici. Međutim, ova simetrija je često nevidljiva zbog retkog korišćenja $\widetilde{\Psi}(p,t)$ u kalkulacijama. Kalkulacije se rade češće korišćenjem realcije :

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x,t)dx \qquad (13.72)$$

Ovaj izraz, a to ćemo kasnije i pokazati se dobija koristeći Furieove transformacione tehnike. Takođe se može pokazati da je ovo i prihvatljivo. Može se pokazati i da prosečna vrednost neodređenosti položaja i impulsa kvantne čestice mase m poštuje odnose nalik klasičnoj fizici :

$$\langle p\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{dt} \qquad (13.73)$$

Operatori

Ovde ćemo da uvedemo ideju koja će postajati sve važnija kako napredujemo kroz osnovne elemente kvantne mehanike. Ta ideja se sastoji u tome da se posmatranja u kvantnoj mehanici mogu opisati operatorima. Recept za kalkulacije je sledeći :

- Pripremite sendvič sa Ψ^* i Ψ
- Da bi našli $\langle x\rangle$ ubacite x u sendvič, a za pronalaženje $\langle p\rangle$ ubacite $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$
- Zatim integralite preko x

U ovom receptu, posmatrane pozicije su predstavljene sa x a posmatrani impulsi sa $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. Međutim obadva ova člana možemo posmatrati kao operatore koji deluju na talasnu funkciju: realan broj x samo multiplicira $\Psi(x,t)$ za x puta, a diferencijalni izraz $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ diferencira $\Psi(x,t)$ i multiplicira ga za faktor $-i\hbar$. Da se naglasi uloga operatora u kvantnoj fizici možemo prepisati jednačine (13.70) i (13.72) kao :

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\hat{x}\Psi(x,t)dx \quad i \;\; \langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\hat{p}\Psi(x,t)\,dx \qquad (13.74)$$

Znak iznad x i p označava operator. Dakle :

$$\hat{x} = x\,, \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \qquad (13.75)$$

Generalizacija ove ideje za kvantnu česticu koja se kreće u trodimenzionalnom prostoru je jednostavna :

$$\hat{r} = r\,, \hat{p} = -i\hbar\nabla \qquad (13.76)$$

, i očekivane vrednosti za položaj i impuls su date trodimenzionalnim sendvič integralima :

$$\langle r\rangle = \int \Psi^*(\mathrm{r},\mathrm{t})\hat{\mathrm{r}}\Psi(\mathrm{r},\mathrm{t})\,d^3r \quad i \quad \langle p\rangle = \int \Psi^*(\mathrm{r},\mathrm{t})\hat{\mathrm{p}}\Psi(\mathrm{r},\mathrm{t})\,d^3r \qquad (13.77)$$

Na kraju treba naglasiti da poredak u kome se pišu operatori je važan.

Neodređenosti

Operatori se takođe koriste za izračunavanje neodređenosti u poziciji i impulsu. Prema jednačini (13.54) te neodređenosti su date sa :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}\;, \qquad \Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2} \qquad (13.78)$$

Očekivane vrednosti za x i p su date relacijama (13.74) , a očekivane vrednosti za x^2 i p^2 mogu se pronaći generalizacijom ovih jednačina. One su date sledećim sendvič integralima :

$$\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\hat{x}^2\Psi(x,t)dx \quad i \quad \langle p^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\mathrm{x},\mathrm{t})\,\hat{p}^2\Psi(x,t)dx \qquad (13.79)$$

, gde je operator $\hat{x}^2$ ekvivalentan sa $\hat{x}\cdot\hat{x}$, a $\hat{p}^2 = \hat{p}\cdot\hat{p}$. Koristeći jednačinu (13.75) imamo :

$$\hat{x}^2 = x^2 \; i \;\; \hat{p}^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} \qquad (13.80)$$

Stvarne vrednosti neodređenosti položaja i impulsa više zavise od forme talasne funkcije. Na primer, za talasnu funkciju

$$\Psi(x) = Ne^{-x/2a}$$

, neodređenosti su $\Delta x = a/\sqrt{2}$ i $\Delta p = \hbar/a\sqrt{2}$. Primetimo da, u ovom primeru, proizvod neodređenosti je :

$$\Delta x\Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

, što je u saglasnosti sa Hajzenbergovim principom neodređenosti.

KVANTNA STANJA

Videli smo da postoje načini da talasna funkcija opiše i talasnu i čestičnu prirodu kvantne čestice. Videli smo da se ova slagalica može rešiti ako talasnu funkciju čestice regulišu potencijalni ishodi merenja nad česticom. Ovakvo tumačenje talasne funkcije je transformisalo filozofsku osnovu fizike. Fizika više ne može da previdi ishod, to je sada verovatnoća sa nizom mogućih ishoda. Verujem da postoje mnogi kojima se ova ideja ne sviđa, ali na sreću univerzum ima svoja pravila koja ne zavise od toga šta nam se sviđa šta ne. A nedvosmisleno funkcioniše. Nije jasno da li se verovatnoća u kvantnoj mehanici koristi, kao i u kinetičkoj teoriji gasova da prikrije naše neznanje o specifičnim opisima čestica, opisima koji bi omogućavali tačno merenje pozicije i impulsa ili je verovatnoća esencijalni sastojak univerzuma. U drugom slučaju besmisleno je pričati o tome gde je čestica pre merenja, jer samo merenje definitivno natera česticu da izabere jedan položaj, jednu poziciju. Pre toga može biti bilo gde. Međutim ovi problemi postoje od samih početaka kvantne mehanike i ne postoji saglasnost o njima. Međutim, ovde nama nije cilj da raspravljamo o ovome, to ćemo da radimo u nekim kasnijim poglavljima koja će se baviti filozofijom fizike, već da u potpunosti shvatimo snagu i eleganciju kvantne mehanike koja obezbeđuje precizno analiziranje mikroskopskog sveta. A taj cilj možemo ispuniti samo intuitivnim razumevanjem talasnih funkcija. Osnovna ideja je da talasna funkcija predstavlja kvantno stanje čestice, stanje kretanja koje nosi samo prolaznu sličnost sa trajaktorijama čestica iz klasične fizike. Sada je najvažnije da se definišu sledeće osobine kvantnih stanja :

- U odsustvu merenja kvantno stanje evoluira sa vremenom glatko i deterministički u skladu sa vremenski zavisnom Šredingerovom jednačinom
- Kvantno stanje opisuje mogućnosti koje mogu postati stvarnost. Kvantno stanje može predvideti moguće ishode položaja i impulsa pri merenju i šanse za pojavu ovih ishoda. Opštije rečeno, kvantno stanje može predvideti ishod svakog merenja.
- Kvantno stanje je linearna superpozicija drugih kvantnih stanja, što znači da jedna čestica koja je u jednom kvantnom stanju je takođe istovremeno i u drugim kvantnim stanjima.Ovo svojstvo se zove princip linearne superpozicije. Koristili smo ovaj princip kada smo pisali talasnu funkciju za čestice koje prolaze kroz oba proreza i kada smo tvrdili da talasna funkcija može da opiše česticu sa nizom mogućih impulsa. Koristili smo ga i kada smo razmatrali talasnu funkciju čestice sa opsegom mogućih energija.
- Kvantno stanje je krhko. Kada se dešava merenje, kvantno stanje se uništava i zamenjuje se novim kvantnim stanjem koje je kompatibilno sa slučajnim ishodom merenja. Ovaj nagli i nedeterministički proces se zove urušavanje talasne funkcije. Ovo smo koristili kod objašnjenja zašto ne postoji interferencijska slika kod eksperimenta sa dva proreza kada otkrijemo odakle dolaze čestice, tj kroz koji prorez prolaze. U velikoj meri urušavanje talasne funkcije je proizvoljno pravilo koje premošćava jaz između situacija kada nema merenja i kada ih ima. Mehanizam koji dovodi do urušavanja talasne funkcije nije poznat.

ENERGIJA I VREME

U kvantnoj mehanici, vidljive veličine su opisane operatorima. U prethodnom poglavlju smo videli da su pozicija i impuls opisani sa :

$$\hat{r} = r\,, \hat{p} = -i\hbar\nabla \quad (14.1)$$

Energija u kvantnoj mehanici se opisuje operatorom koji se naziva Hamiltonijan i obeležava se sa $\widehat{H}$. Ovde ćemo pretpostaviti da relacije između operatora energije, impulsa i pozicije su slične relacijama koje važe u klasičnoj fizici između istih pojmova. Konkretno, pretpostavićemo da je Hamiltonijan operator za česticu mase m i potencijalne energije V(r) dat sa:

$$\widehat{H} = \frac{\hat{p}}{2m} + V(\hat{r}) \quad (14.2)$$

Koristeći (14.1) dobijamo :

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V(r) \quad (14.3)$$

Hamiltonijan u kvantnoj mehanici igra dvostruku ulogu. Prvo operator $\widehat{H}$ opisuje opservabilnu energiju. Na primer, recept za očekivanu vrednost koji smo opisali u prethodnom poglavlju implicira da je energija očekivane vrednosti u trenutku t, za česticu sa talasnom funkcijom $\Psi(r,t)$:

$$\langle E \rangle = \int \Psi^*(r,t)\widehat{H}\Psi(r,t)d^3r \quad (14.4)$$

Drugo, Hamiltonijan uređuje vreme evolucije talasne funkcije pošto Średingerova jednačina je sada :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \widehat{H}\Psi \quad (14.5)$$

Dakle u kvantnoj mehanici postoji fundamentalna veza između energije i vremena. Istražićemo ovu vezu traženjem rešenja Średingerove jednačine. Koristićemo istu proceduru koju smo već koristili kod klasične talasne jednačine ili kod difuzione relacije. Tražićemo odvojiva rešenja i onda rešiti problem svojstvenih vrednosti. Pošto je ovaj problem proizvoljan i apstraktan, najbolje je da krenemo od najjednostavnijeg slučaja, problema nalaženja normalnog moda vibrirajuće strune. Neka $\Psi(x,t)$ predstavlja poprečno pomeranje rastegnute strune u tački x u trenutku t. Ovo pomeranje je određeno klasičnom talasnom jednačinom :

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0 \quad (14.6)$$

, gde je c brzina talasa u struni. Ako su krajevi strune fiksirani u tačkama $x = 0\ i\ x = a$, tražićemo rešenja talasne jednačine koja zadovoljavaju granične uslove :

$$\Psi(x,t) = 0\ \ za\ x = 0\ i\ za\ x = a\,, za\ svako\ t \quad (14.7)$$

Postoji beskonačno mnogo takvih rešenja pošto struna može da vibrira na beskonačno mnogo načina. U normalnom režimu, rešenja su poprilično jednostavna. Ona odgovaraju vibracijama, gde sve tačke na struni vibriraju sa istom vremenskom zavisnošću. Ova rešenja imaju odvojive forme :

$$\Psi(x,t) = \psi(x)T(t) \quad (14.8)$$

Funkcija $T(t)$ opisuje zajedničku vremensku zavisnost svih tačaka, a $\psi(x)$ opisuje prostorni oblik vibracija. Ako ovo ubacimo u talasnu jednačinu (14.6) i ako pažljivo razdvojimo funkcije koje zavise od t od onih koje zavise od x dobijamo:

$$\frac{1}{T}\frac{d^2T}{dt^2} = \frac{c^2}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} \quad (14.9)$$

Znak jednakosti u ovoj jednačini znači da funkcija od t, sa leve strane je uvek jednaka funkciji od x sa desne strane za svako x i t. Ovo može da bude tačno samo ako su obadve funkcije jednake istoj konstanti. Označićemo ovu konstantu sa $-\omega^2$, i uzećemo takođe da je $\omega = ck$, gde je k druga konstanta. Izjednačavanjem leve i desne strane jednačine sa ovom konstantnom dobićemo rešenja za T(t) i ψ(x) za normalan režim oscilovanja. Vremenska zavisnost T(t) se upravlja rema diferencijalnoj jednačini :

$$\frac{d^2T}{dt^2} = -\omega^2 T \quad (14.10)$$

Opšte rešenje ove jednačine je:

$$T(t) = A\cos\omega t + B\sin\omega t \quad (14.11)$$

, gde su A i B proizvoljne konstante. Ova jednačina opisuje sinusoidalno kretanje sa ugaonom frekvencijom ω koja je kao i obično neodređena. Funkcija normalnog režima ψ(x) je određena diferencijalnom jednačinom :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad (14.12)$$

Ona takođe zadovoljava granične uslove :

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \quad (14.13)$$

Opšte rešenje ove diferencijalne jednačine je :

$$\psi(x) = M\cos kx + N\sin kx \quad (14.14)$$

, gde su M i N proizvoljne konstante. Granični uslovi na x=0 daju M=0 a za $x = a$, ograničavaju vrednosti k na $\pi/a, 2\pi/a, 3\pi/a, \ldots$. Dakle postoji beskonačan broj rešenja normalnog režima sa rostornim oblikom datim sa:

$$\psi_n(x) = N\sin k_n x\,, \quad k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (14.15)$$

Ako ove prostorne funkcije kombinujemo sa vremenski zavisnim funkcijama, sa ugaonom frekvencijom $\omega_n = ck_n$, dobijamo kompletnu specifikaciju rešenja normalnog režima.

$$\Psi_n(x,t) = [A_n \cos \omega_n t + B_n \sin \omega_n t] \sin k_n x \qquad (14.16)$$

Pošto je klasična talasna jednačina (14.6) , homogena linearna parcijalna diferencijalna jednačina, linearna superpozicija rešenja normalnog režima, je takođe rešenje. Zaista, može se pokazati da je kretanje vibrirajuće strune sa pričvšćenim krajevima dato sa:

$$\Psi_n(x,t) = \sum_{n=1,2,3\ldots} [A_n \cos \omega_n t + B_n \sin \omega_n t] \sin k_n x \qquad (14.17)$$

Ako je poznat inicijalni pomak i brzina svake tačke strune, serijom Furieovih transformacija mogu se pronaći konstante A_n i B_n za svaki član u seriji. Pronalaženjem rešenja normalnog režima vibrirajuće strune rešili smo jedan problem svojstvenih vrednosti. Problem svojstvenih vrednosti je rešen diferencijalnom jednačinom (14.12), i graničnim uslovima. Primetimo da diferencijalna jednačina sadrži neodređeni član k, pa rešenje sopstvenih vrednosti postoji samo za neke vrednosti k, definisane sa (14.14). Funkcija $\psi_n(x) = N \sin k_n x$ se zove sopstvena funkcija pripadajućih sopstvenih vrednosti $k_n = n\pi/a$.

STANJA ODREĐENE ENERGIJE

Sada ćemo da adaptiramo rešenje vibrirajuće strune da dobijemo rešenje Šredingerove jednačine. Šredingerova jednačina za česticu mase m i potencijala V(r) je :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \Psi \qquad (14.18)$$

Kao i u primeru sa vibrirajućom strunom pronaćemo razdvojivo rešenje u formi :

$$\Psi(r,t) = \psi(r) T(t) \qquad (14.19)$$

Istim postupkom razdvajanja dobijamo :

$$\frac{i\hbar}{T} \frac{dT}{dt} = \frac{1}{\psi} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(r) \psi \right] \qquad (14.19)$$

I ovde imamo isti slučaj da obadve strane moraju biti jednake istoj konstanti da bi jednakost bila zadovoljena za svako x i t. Označićemo ovu konstantu sa E. Izjedančavajući obadve strane sa ovom konstantnom, dobijamo separatna rešenja za Šredingerovu jednačinu.

Vremenski zavisna funkcija T(t) je oblika diferencijalne jednačine :

$$\frac{dT}{dt} = \left(\frac{-iE}{\hbar} \right) T \qquad (14.20)$$

, čije je opšte rešenje :

$$T(t) = Ae^{-iEt/\hbar} \quad (14.21)$$

, gde je A proizvoljna konstanta. Konstanta E je kao i uvek neodređena ali nije teško pogoditi njeno značenje. Prostorni oblik ψ(x) talasne funkcije je određen diferencijalnom jednačinom :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(r) = E\psi(r) \quad (14.22)$$

, koju možemo prepisati jezgrovitije kao :

$$\hat{H}\psi(r) = E\psi(r) \quad (14.23)$$

Ova jednačina se zove jednačina energetskih sopstvenih vrednosti, a funkcija ψ(x) se zove svojstvena funkcija pripadajućih svojstvenih vrednosti E. Ova jednačina ima i naziv vremenski nezavisna Šredingerova jednačina. Svojstvena funkcija Hamiltonijana je veoma posebna matematička funkcija. Kada komplikovan operator $\hat{H}$ deluje na funkciju očekujemo u najmanju ruku zbrku, ali kada se radi o svojstvenoj funkciji on daje istu funkciju pomnoženu konstantnom. Kombinovanjem ovih funkcija dobijamo specijalno rešenje Šredingerove jednačine :

$$\Psi(r,t) = \psi(r)e^{-iEt/\hbar} \quad (14.24)$$

Sada ćemo da pokažemo da ova funkcija predstavlja stanja sa oštro definisanom energijom E. U principu kada god merimo energiju ishod je neizvestan. Analogno neodređenosti impulsa možemo da za energiju pišemo :

$$\Delta E = \sqrt{\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2} \quad (14.25)$$

, gde je $\langle E\rangle$ očekivana vrednost energije a $\langle E^2\rangle$ je očekivana vrednost kvadrata energije. Ove očekivane vrednosti za česticu sa normalizovanom talasnom funkcijom $\Psi(r,t)$ su date sendvič integralom :

$$\langle E\rangle = \int \Psi^*(r,t)\hat{H}\Psi(r,t)d^3r \quad (14.26)$$

, i

$$\langle E^2\rangle = \int \Psi^*(r,t)\hat{H}^2\Psi(r,t)d^3r \quad (14.27)$$

Ove integrale je lakoproceniti kada je talsna funkcija data sa (14.24). U specijalnom slučaju talasna funkcija Ψ(r,t) je slično kao i kao i ψ(r), svojstvena funkcija Hamiltonijana, sa svojstvenom vrednošću E i možemo da iskoristimo :

$$\hat{H}\Psi(r,t) = E\Psi(r,t) \quad (14.28)$$

, da dobijemo

$$\langle E\rangle = \int \Psi^*(r,t)\hat{H}\Psi(r,t)d^3r = E\int \Psi^*(r,t)\Psi(r,t)d^3r = E \quad (14.29)$$

Štaviše, ako je Ψ svojstvena funkcija Hamiltonijana, ona je takođe svojstvena funkcija proizvoda Hamiltonijana. Koristeći

$$\hat{H}^2\Psi(r,t) = E^2\Psi(r,t) \quad (14.30)$$

, dobijamo

$$\langle E^2 \rangle = \int \Psi^*(r,t)\hat{H}^2\Psi(r,t)d^3r = E^2 \int \Psi^*(r,t)\Psi(r,t)d^3r = E^2 \quad (14.31)$$

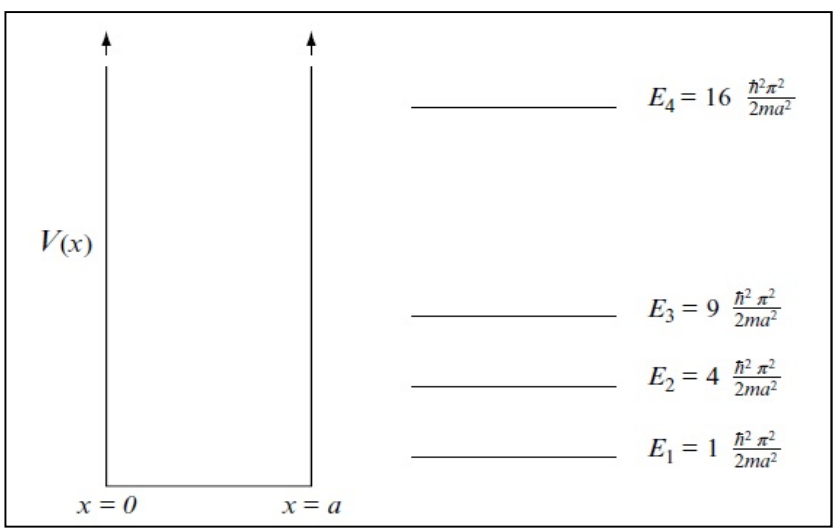
Kada ove vrednosti ubacimo u jednačinu (14.25) dobijamo da je neodređenost energije nula. Ovaj rezultat implicira da će rezultat merenja energije biti izvestan i jednak E kada je talasna funkcija svojstvena funkcija Hamiltonijana sa svojstvenom vrednošću E. Zaključimo na kraju da svojstvena funkcija Hamiltonijana uvek opisuje stanje određene energije.

ČESTICE U OGRANIČENOM PROSTORU

Jedna od ključnih karakteristika kvantne mehanike je da su moguće energije zatvorenih čestica kvantizovane. Zaista, poznati kvantni energetski nivoi atomske, nuklearne i fizike čestica se manifestuju u ograničenim prostorima. Zamislimo da imamo česticu koja se kreće u jednoj dimenziji sa potencijalnom energijom :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & za\ \ 0 < x < a \\ \infty & ,\ \ drugde \end{cases} \quad (14.32)$$

Ovaj beskonačni potencijal ograničava česticu na kutiju dimezije a kao na slici 14.01.



Slika 14.01

Niži energetski nivoi čestice mase m ograničene beskrajnim kvadratnim potencijalom V(x), širine a.

U klasičnoj fizici, čestica ili leži na dnu potencijalne barijere sa energijom nula ili se odbija napred i nazad, između prepreka na $x = 0\ i\ x = a$, sa bilo kojom energijom. U kvantnoj fizici postoji mnogo više različitih stanja čestice. Svako je opisano sa talasnom funkcijom $\Psi(x,t)$ koja se pokorava jednodimenzionalnoj Šredingerovoj jednačini :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\Psi \qquad (14.33)$$

Međutim, kada čestica ima neku određenu energiju E, talasna funkcija ima specijalnu formu :

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \qquad (14.34)$$

, gde $\psi(x)$ zadovoljava energetsku svojstvenu jednačinu :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(\mathrm{x}) = \mathrm{E}\psi(\mathrm{x}) \qquad (14.35)$$

Sada treba naći fizički rihvatljivo rešenje jednačine (14.35). Pošto potencijalna energija raste naglo do beskonačnosti za $x = 0\ i\ x = a$, čestica je ograničena na region $0 < x < a$, a van tog regiona je funkcija ψ(x) jednaka nuli. Unutar regiona, potencijalna energija je jednaka nuli i svojstvena funkcija je rešenje jednačine (14.35), sa V(x)=0. Pojednostavićemo ovu jednačinu tako što ćemo uzeti da je :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (14.36)$$

, pa dobijamo :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \qquad (14.37)$$

Fizički prihvatljivo rešenje ove diferencijalne jednačine dobijamo preko opšteg rešenja:

$$\psi(x) = M\cos kx + N\sin kx$$

, gde su M i N konstante, i preko graničnih uslova :

$$\psi(0) = \psi(a) = 0$$

, koji osiguravaju da se raspodela verovatnoće čestica ne promeni naglo na ivicama okvira. Može se primetiti da je problem sopstvenih vrednosti energije čestica u ovom okviru isti kao i problem vibrirajuće strune koji smo imali ranije. U obadva slučaja postoji beskonačan broj svojstvenih funkcija označenih sa celim brojevima n=1,2,3 ... . One su date sa :

$$\psi_n(x) = N\sin k_n x \ , \qquad k_n = \frac{n\pi}{a} \qquad (14.38)$$

, gde je N proizvoljna konstanta. U klasičnoj fizici svojstvena funkcija $\psi_n(x)$ se može koristiti za opis mogućih oblika u normalnom režimu vibriranja struna. U kvantnoj fizici one mogu da se koriste za opise mogućih vrednosti talasnih funkcija čestice zatvorene u oblasti, sa određenim energijama označenim sa kvantnim brojevima n=1,2,3,... . Zaključujemo dakle da su mogući energetski nivoi čestica u jednodimenzionalnoj oblasti širine a dati sa :

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad , za\ n = 1,2,3,\ldots \qquad (14.39)$$

, i da čestica sa energijom E_n ima talasnu funkciju u formi :

$$\Psi_n(x,t) = N \sin k_n x\, e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \qquad (14.40)$$

Primetimo sledeće :

- Kao što se vidi na slici 14.01, razmak između kvantnih nivoa raste sa porastom kvantnog broja n. Međutim ovo rastojanje kao funkcija energije opada :
$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} \to \frac{2}{n} \quad , za\ n \to \infty$$
Ovo znači da diskretna priroda energetskih nivoa postaje manje važna na većim energijama.
- Najniža moguća energija, za razliku od klasične fizike nije nula već
$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$
Ovu tačku nulte energije možemo razumeti preko Hajzenbergovog principa neodređenosti. Ako je česticca zarobljena u regionu širine a onda je neodređenost njenog položaja $\Delta x < a$, a neodređenost impulasa je bar reda $\hbar/2a$. Pošto je prosečna amplituda impulsa uvek veća od Δp, prosečna knetička energija čestice je uvek veća od $(\Delta p)^2/2m$, što je zauzvat više od $\hbar^2/8ma^2$.
- Prostorni oblik talasne funkcije čestice u ograničenom prostoru, energije E_n je identičan prostornom obliku normalnog režima strune sa ugaonom frekvencijom ω_n.
- Talasna funkcija čestice u ograničenom prostoru, za razliku od strune koja može biti izmeštena, nije opservabilna, ali se može koristiti za građenje osobina čestica koje to jesu.

ČESTICA U TRODIMENZIONALNOM PROSTORU

Sada ćemo da razmotrimo relaističniji slučaj čestice zarobljene u trodimenionalnom prostoru. Ako čestica ima određenu energiju E, njena talasna funkcija ima formu :

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-iEt/\hbar} \qquad (14.41)$$

, gde $\psi(x,y,z)$ zadovoljava svojstvenu jednačinu energije :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z)\right]\psi = E\psi \qquad (14.42)$$

Možemo da izaberemo funkciju potencijala :

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c \\ \infty, & drugde \end{cases} \qquad (14.43)$$

, koja ograničava česticu na kutiju dimenzija a,b,c . Moguća svojstvena jednačina energije i svojstvene vrednosti čestice mogu biti pronađeni ako nađemo rešenje jednačine (14.42), imajući u vidu da je ona jednaka nuli na svih 6 strana kutije. Na primer, funkcija :

$$\psi(x,y,z) = N \sin\frac{\pi x}{a} \sin\frac{\pi y}{b} \sin\frac{\pi z}{c}$$

, zadovoljava tražene uslove ako vredi :

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left[\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}\right]$$

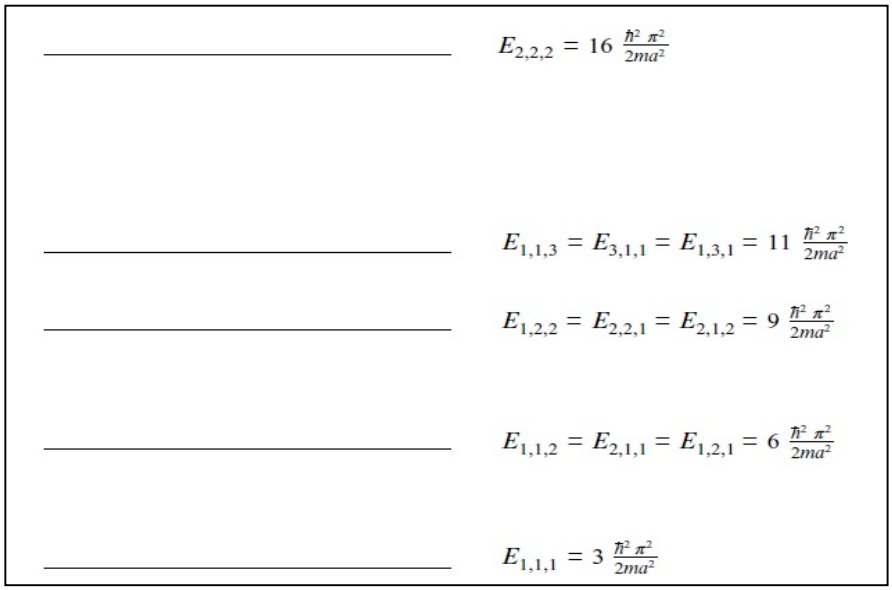
Uopšteno, postoji beskrajan set svojstvenih funkcija i svojstvenih vrednosti označenih sa tri kvantna broja : $n_x = 1,2,3 \dots$, $n_y = 1,2,3, \dots$, $n_z = 1,2,3, \dots$. Svojstvene funkcije imaju formu :

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = N \sin\frac{n_x \pi x}{a} \sin\frac{n_y \pi y}{b} \sin\frac{n_z \pi z}{c} \qquad (14.44)$$

, a svojstvena funkcija energije ima formu :

$$E_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left[\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right] \qquad (14.45)$$

Jednačina (14.45) pokazuje kako kvantni energetski nivoi čestice u kutiji zavise od tri dimenzije kutije ,a,b,c . Ono što je najvažnije ona pokazuje da se ovi nivoi mogu podudarati kada kutija ima specifične dimenzije. Ovo možemo da vidimo na slici 14.02.



Slika 14.02 Energetski nivoi u trodimenzionalnom prostoru koji ograničava kvantnu česticu

Kada postoji nekoliko stanja ili talasnih funkcija sa istom energijom, za energetske nivoe se kaže da su degenerisani. Ovi nivoi su veoma značajni u atomskoj, nuklearnoj i fizici čestica. Oni nastaju jer interakcije koje ograničavaju elektrone u atomu, nukleone u jezgru, kvarkove u hedronima, imaju specifične osobine simetrije.

NEODREĐENA ENERGETSKA STANJA

U prethodnom poglavlju smo videli da kvantna stanja sa jasno definisanim energijama E_n, su predstavljena talasnom funkcijom :

$$\Psi_n(r,t) = \psi_n(r) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \qquad (14.46)$$

Ovde ćemo da pokažemo da stanja sa neodređenom energijom su predstavljena sa talsnom funkcijom oblika :

$$\Psi(r,t) = \sum_{n=1,2,3\ldots} c_n \psi_n(r) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (14.47)$$

Da bismo to uradili moramo da razumemo dva koncepta. Jedan je matematički koncept seta baznih funkcija a drugi fizički koncept energetske verovatnoće amplituda.

Pošto je Šredingerova jednačina linearna homogena parcijalna diferencijalna jednačina, linearna superpozicija talasne funkcije određenih energija je takođe rešenje jednačine. Na primer, opšta talasna jednačina za čestice u jednodimenzionalnom ograničenom prostoru je :

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1,2,3\ldots} c_n \Psi_n(x,t) \quad (14.48)$$

, gde je :

$$\Psi_n(x,t) = N \sin k_n x \, e^{-iE_n t/\hbar} \quad (14.49)$$

, gde je c_n proizvoljna kompleksna konstanta. Ova jednačina je veoma slična jednačini za opšti slučaj kretanja vibrirajuće strune. U jednom slučaju imamo opštu talasnu jednačinu izraženu kao linearnu superpoziciju talasnih funkcija sa određenim energijama, i u drugom imamo opštu vibraciju izraženu preko linearne superpozicije normalnih režima. U oba slučaja imamo linearnu superpoziciju sinusnih funkcija ili Furieovu sinusni red. U komplikovanijim slučajevima opšti Furieov red se mora kosristiti. Takav red, sličnan običnom Furieovom redu, je baziran na ideji da svojstvene funkcije Hamiltonijana formiraju kompletan ortonormalan skup osnovnih funkcija. Za ilustraciju ove ideje razmotrićemo Hamiltonijan koji dovodi do beskonačnog seta svojstvenih funkcija energije i svojstvenih vrednosti označenih sa $\psi_n(r)$ i E_n, sa n=1,2,3... . Može se pokazati da ove svojstvene funkcije formiraju kompletan ortonormalan skup baznih funkcija. Ovo znači tri stvari :

- Svaka svojstvena funkcija može biti normalizovana tako da važi :

$$\int |\psi_n(r)|^2 d^3r = 1 \quad (14.50)$$

- Sve svojstvene funkcije ψ_n i ψ_m pripadajuća različitim diskretnim E_m i E_n, su ortonormalne, tj zadovoljavaju relaciju :

$$\int \psi_m^*(r)\psi_n(r) d^3r = 0, \qquad za\ E_m \neq E_n \quad (14.51)$$

  Svojstvene funkcije kojima pripadaju degenerisane svojstvene vrednosti $E_m = E_n$, nisu jedinstveno definisane. Jedino mogu koristiti ovu širinu kako bi bili ortogonalni. Ortogonalna relacija se onda smatra opštom.
- Svojstvena funkcija formira kompletan set zato što je uvek moguće da izrazi bilo koju talasnu funkciju kao linearnu superpoziciju svojstvenih funkcija. Ovaj izraz je opšti Furieov red u formi :

$$\Psi(r,t) = \sum_{n=1,2,3\ldots} c_n \psi_n(r) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (14.52)$$

, gde je c_n kompleksna konstanta.

Koeficijenti c_n opšteg Furieovog reda mogu se pronaći ako nam je poznat inicijalni oblik talasne funkcije. Na primer, za nalaženje c_3 razmotrimo :

$$\Psi(r,0) = c_1\psi_1(r) + c_2\psi_2(r) + c_3\psi_3(r) + \cdots$$

, i pomnožimo obe strane sa $\psi_3^*(r)$. Ako integralimo preko r i ako koristimo normalizaciju i ortogonalnost integrala (jenačine 14.51 i 14.52) dobijamo :

$$\int \psi_3^*(r)\Psi(r,0)d^3r = c_3$$

Očigledno je da opšti izraz za koeficijent c_n je :

$$c_n = \int \psi_n^*(r)\Psi(r,0)d^3r \qquad (14.53)$$

Naoružani ovim koeficijentima, koristeći jednačinu (14.52) možemo voditi evidenciju naknadne evolucije talasne funkcije.

ENERGETSKI VEROVATNE EMPLITUDE

Sada ćemo razmotriti fizičku interpretaciju talasne funkcije date preko linearne superpozicije svojstvenih funkcija energije :

$$\Psi(r,t) = \sum_{n=1,2\ldots} c_n\psi_n(r)e^{-iE_nt/\hbar} \qquad (14.54)$$

Prvi korak je pronaći uslove za koje će ova talasna funkcija biti normalizovana. Normalizacioni integral $\int \Psi^*\Psi d^3r$ ima formu :

$$\int \left[c_1^*\psi_1^*e^{+iE_1t/\hbar} + c_2^*\psi_2^*e^{+iE_2t/\hbar} + \cdots\right]\left[c_1^*\psi_1^*e^{-iE_1t/\hbar} + c_2^*\psi_2^*e^{-iE_2t/\hbar} + \cdots\right]d^3r$$

Koristeći normalizacione i ortogonalne relacije za svojstvene funkcije $\psi_n(r)$, nalazimo da su članovi jednačine oblika :

$$c_2^*c_1e^{i(E_2-E_1)t/\hbar}\int \psi_2^*\psi_1 d^3r$$

, jednaki nuli a članovi oblika :

$$c_1^*c_1\int \psi_1^*\psi_1 d^3r$$

, pridonose sa $|c_1|^2$. Dakle, dobijamo :

$$\int \Psi^* \Psi d^3r = \sum_{n=1,2\ldots} |c_n|^2$$

, i zaključujemo da je talasna funkcija normalizovana ako koeficijenti c_n zadovoljavaju uslov :

$$\sum_{n=1,2\ldots} |c_n|^2 = 1 \quad (14.55)$$

Sada ćemo da izračunamo očekivane vrednosti energije i kvadrata energije čestica sa talasnom funkcijom (14.54). One su date preko relacija :

$$\langle E \rangle = \int \Psi^* \hat{H} \Psi d^3r \quad i \quad \langle E^2 \rangle = \int \Psi^* \hat{H}^2 \Psi d^3r$$

Da bi procenili ove integrale kada je talasna funkcija superpozicija svojstvenih funkcija ψ_n , iskoristićemo

$$\hat{H}\psi_n(r) = E_n \psi_n(r) \quad i \quad \hat{H}^2 \psi_n(r) = E_n^2 \psi_n(r)$$

, i ortogonalne i hormalizacione relacije (14.50) i (14.51). Na kraju dobijamo :

$$\langle E \rangle = \sum_{n=1,2,\ldots} |c_n|^2 E_n \quad i \quad \langle E^2 \rangle = \sum_{n=1,2,\ldots} |c_n|^2 E_n^2 \quad (14.56)$$

Sada umemo da povežemo fizičko značenje sa kompleksnim koeficijentima c_n. Ako se prisetimo opšteg izraza za verovatnoću distribucije vidimo da je :

$$p_n = |c_n|^2 \quad n = 1,2,3, \ldots \quad (14.57)$$

Jednačina (14.54) pokazuje da je distribucija normalizovana a jednačine (14.56) pokazuju da $p_n = |c_n|^2$ predstavlja verovatnoću da energija bude E_n. Zbog toga se koeficijenti c_n nazivaju energetski verovatne amplitude.

VREMENSKA ZAVISNOST

Ovde ćemo da razmotrimo fundamentalne veze između energije i vremenske zavisnosti opservabilnih osobina kvantnih stanja. Razmotrimo česticu sa talasnom funkcijom :

$$\Psi_n(r,t) = \psi_n(r) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (14.58)$$

, koja definiše kvantno stanje sa jasno definisanom energijom E_n. Mada je vremenska zavisnost opisana kompleksnim eksponentom, koji oscilira sa ugaonom frekvencijom $E_n/\hbar$, opservabilne osobine čestice se ne menjaju s vremenom. Ovo ćemo ilustrovati tako što ćemo da pokažemo da je raspodela verovatnoće pozicije nezavisna od vremena :

$$\Psi_n^*(r,t)\Psi_n(r,t) = \psi_n^*(r) e^{+iE_n t/\hbar} \psi_n(r) e^{-iE_n t/\hbar} = \psi_n^*(r)\psi_n(r)$$

Činjenica je dakle da $\Psi_n(r,t)$ opisuje kvantno stanje bez opservabilne vremenske zavisnosti. Verovatnoća i očekivana vrednost za bilo koju opservaciju se nikada ne menjaju. Takvo stanje se naziva stacionarno stanje. Međutim, kvantno stanje neodređene energije ima opservabilnu vremensku zavisnost. Da bi ovo pokazali razmotrićemo česticu sa talasnom funkcijom :

$$\Psi_n(r,t) = \sqrt{\frac{1}{2}}\psi_1(r)e^{-iE_1t/\hbar} + \sqrt{\frac{1}{2}}\psi_2(r)e^{-iE_2t/\hbar} \quad (14.59)$$

U ovom slučaju postoje dva moguća ishoda merenja energije, E_1 sa verovatnoćom ½ i E_2 sa istom tolikom verovatnoćom. Očekivane vrednosti energije su :

$$\langle E\rangle = \frac{1}{2}E_1 + \frac{1}{2}E_2 \quad i \quad \langle E^2\rangle = \frac{1}{2}E_1^2 + \frac{1}{2}E_2^2$$

, a neodređenost energije je :

$$\Delta E = \sqrt{\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2} = \frac{1}{2}|E_1 - E_2|$$

Raspodela verovatnoće pozicije za ovo stanje neodređenosti energije je vremenski nezavisna i data je sa :

$$\Psi^*\Psi = \frac{1}{2}\left[|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^*\psi_2 e^{+i(E_1-E_2)t/\hbar} + \psi_1\psi_2^* e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar}\right]$$

, i oscilira sa ugaonom frekvencijom $|E_1 - E_2|/\hbar$, tj sa periodom $2\pi\hbar/|E_1 - E_2|$. Dakle (14.59) reprezentuje kvantno stanje sa neodređenom energijom ΔE koja ima opservabilnu osobinu da osciluje sa periodom $\hbar\pi/\Delta E$. Kvantna stanja neodređene energije se zovu nestacionarna stanja zbog svoje vremenske zavisnosti. U suštini , ova stanje se menjaju brže što je neodređenost energije veća. Ako je δt vremenska skala za začajnu promenu a ΔE neodređenost energije tada je :

$$\delta t \Delta E \approx \hbar \quad (14.60)$$

Ove opšte relacije se često nazivaju Hajzenbergov princpi neodređenosti za vreme i energiju ali bi bolji naziv bio relacija- vreme - neodređenost energije. Vreme, za razliku od pozicije, impulsa ili energije nije opservabilno u kvantnoj mehanici. To je parametar koji se koristi kao oznaka promene sistema. Simbol δt nije neodređenost u ishodu merenja već vremenska skala promene opservabilnih osobina kvantnog stanja. Ako je ova vremenska skala kratka, imamo nestacionarno stanje sa velikom neodređenošću energije. Ako je ova skala beskonačno velika imamo stacionarno stanje jasno definisane energije. U praksi je granica između stacionarnog i nestacionarnog stanja je suptilna. Jasno, osnovno stanje atoma je stanje definitivne energije otuda stacionarno stanje bez vidljive vremenske zavisnosti. Shodno tome, elektroni u atomu, iako imaju kinetičku energiju, nemaju vremenski zavisne osobine. Na prvi pogled, atom u pobuđenom stanju je takođe u stanju jasno određene energije. Zaista, njegova talasna funkcija je svojstvena funkcija energije Hamiltonijana, koji opisuje interakciju između čestica unutar atoma. Kao takav, atom treba da bude u stacionarnom stanju, stanju bez vremenske zavisnosti. Ali atom u eksitovanom stanju može da emituje elektromagnetno zračenje i vraća se u osnovno stanje. On je

međutim u skoro stacionarnom stanju pa prema relaciji (14.60) , njegova neodređenost energije mora biti jako mala. U stvari pobuđeno stanje atoma ima neodređenu energiju jer Hamiltonijan ne opisuje samo interakcije između čestica unutar atoma već i interakcije između ovih čestica i promenjivih elektromagnetnih polja koja su uvek prisutna, čak i u praznom prostoru. Ove interakcije dovode do energetske neodređenosti ΔE, koje u skladu sa jednačinom (14.60) daje :

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\tau} \quad (14.61)$$

, gde je τ srednji životni vek u pobuđenom stanju. Kao posledica toga, talasna dužina zračenja koju emituju atomi u deeksitaciji je neodređena i posmatrana spektralna linija ima prirodnu širinu linije. Ali u većini situacija širina prirodne linije je manja od širine linije koja nastaje usled kretanja i sudaranja atoma. Na kraju, malo je čudno što u kvantnoj mehanici se vreme i prostor tretiraju drugačije, vreme je oznaka, dok se pozicija može meriti. Ako ih tretiramo različito onda je to protivno duhu opšte relativnosti koja naglašava jedinstvo prostora i vremena. Zaista, ovaj nedostatak je problem kvantne mehanike koji se u relativističkoj kvantnoj mehanici ispravlja tako što se i prostoru dodeljuje svojstvo neodređenosti ili nemerljivosti.Obadva pojma postaju operatori kvanntih polja.

POTENCIJALNE JAME I BARIJERE

Uvid u to kako kvantne čestice mogu biti povezane ili rasute u potencijalnom energetskom polju može se dobiti iz modela zasnovanog na potencijalnoj jami i potencijalnoj barijeri. U ovim modelima Šredingerova jednačina se može rešiti uz relativno jednostavnu matematiku. Da bi istražili vezana i nevezana kvantna stanja, razmotrićemo ponašanje čestice mase m u jednodimenzionalnom potencijalnom energetskom polju datom sa :

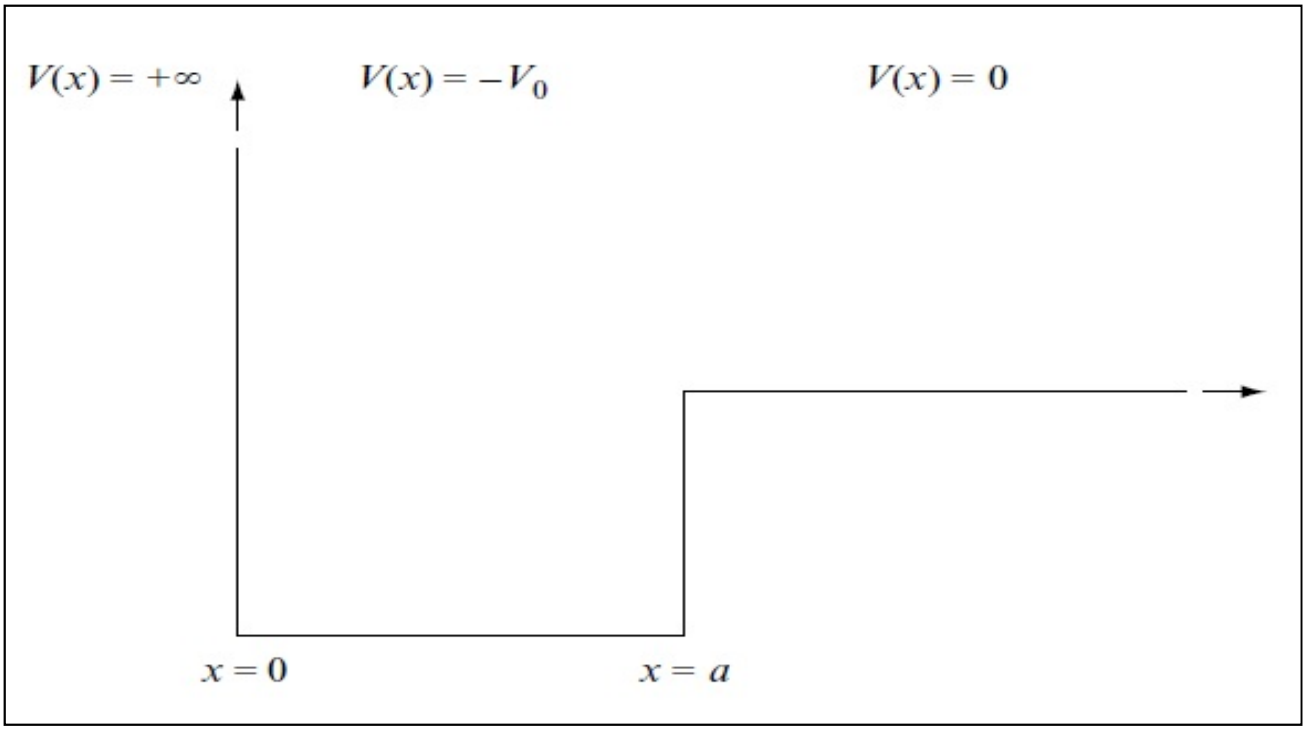
$$V(x) = \begin{cases} \infty & , -\infty < x < 0 \\ -V_0 & , 0 < x < a \\ 0 & , a < x < \infty \end{cases} \quad (14.62)$$

Kao što je prikazano na slici 14.03, potencijalna energija ima drastične promene za $x = 0\ i\ x = a$. Tu je i potencijalna jama koja može ali i ne mora zarobiti česticu, kao i potencijalni zid na x=0 koji odbija čestice. Dobro bi bilo da znamo i kako se u ovom sistemu ponaša klasična čestica. Ukupna energija čestice je data kao suma njene potencijalne i kinetičke energije.

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (14.64)$$

Kada je ova energija negativna ili tamo gde je njena energija u opsegu od $E = -V_0$ i $E = 0$, čestica je vezana ili zarobljena unutar potencijalne jame dubine V_0, i kreće se unutar opsega $0 < x < a$ sa kinetičkom energijom $E + V_0$.

Međutim kada je energija čestice pozitivna tada je čestica nevezana. Na primer, čestica može prići potencijalnoj jami iz pravca $x = +\infty$, sa konetičkom energijom E, povećati svoju energiju na $E + V_0$ kada se približi $x = a$, pogoditi beskonačno visok potencijalni zid na $x = 0$ i vratiti se nazad prema $x = +\infty$.



Slika 14.03 – Šematski izgled potencijalne jame i potencijalne barijere

Ponašanje kvantne čestice u ovom polju se može opisati talasnom funkcijom $\Psi(x,t)$ čije je rešenje Šredingerova jednačina :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi \quad (14.65)$$

Kada čestica ima određenu energiju E, talasna funkcija ima formu :

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (14.66)$$

, gde je ψ(x) svojstvena funkcija koja zadovoljava svojstvene vrednosti energije jednačinom :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad (14.67)$$

Jednom kada rešimo ovu jednačinu svojstvenih vrednosti i pronađemo sve moguće svojstvene vrednosti energije i sve svojstvene funkcije, možemo predstaviti svako kvantno stanje čestice u potencijalnom polju kao linearnu superpoziciju svojstvenih funkcija. Za rešenje jedančine, treba primetiti da potenicjal $V(x)$ dat sa (14.62, ima konstantne vrednosti u tri regiona na x osi ($-\infty < x < 0, 0 < x < a, a < x < +\infty$). Pronaći ćemo rešenje jedančine (14.67) u ova tri regiona i spojiti ih na graničnim slučajevima $x = 0, x = a$, da bi dobili fizički prihvatljivu svojstvenu funkciju. Pošto se potencijal $V(x)$ skokovito menja u $x = 0$ i $x = a$, možemo jedino zahtevati da svojstvena funkcija bude glatka ako je moguće. Konkretno, zahtevaćemo da $\psi(x)$ bude neprekidna na $x = 0$ i $x = a$, da bi izbegli neprihvatljive skokovite promene u verovatnoći gustine pozicije. Diferencijalna jednačina (14.67) sa potencijalom iz (14.62) tada implicira

da prvi izvod $\psi(x)$ bude neprekidan u $x = a$ i prekidan u $x = 0$. Nama su interesantna dva tipa svojstvenih funkcija. Svojstvene funkcije vezanih stanja i vezane funkcije nevezanih stanja. Ako vezano stanje postoji, ono ima negativnu energiju svuda između $E = -V_0$ i $E = 0$. Ovde ćemo uzeti da je $E = -\epsilon$, gde je ϵ energija vezivanja. U regionu $-\infty < x < 0$, potencijalna energija je beskonačna a samim ti i jedino moguće rešenje jednačine je (14.67) je $\psi(x) = 0$, označavajući da se čestica nikada ne može naći u negativnom x regionu. U regionu $0 < x < a$, potencijalna energija je $V(x) = -V_0$, a jednačina (14.67) ima formu :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k_0^2\psi \text{ , gde je } \quad E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} - V_0 \qquad (14.68)$$

Opšte rešenje ove druge po redu diferencijalne jednačine ima formu :

$$\psi(x) = C\sin(k_0 x + \gamma)$$

, gde su C i γ proizvoljne konstante. Da bi obezbedili neprekidnost $\psi(x)$ u $x = 0$, postavićemo $\gamma = 0$ pa imamo da je sada opšte rešenje :

$$\psi(x) = C\sin(k_0 x) \qquad (14.69)$$

U regionu $a < x < \infty$, potencijalna energija je nula i jednačina (14.67) ima formu :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \alpha^2\psi \quad \text{, gde je } E = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} \qquad (14.70)$$

Opšte rešenje ove jednačine je :

$$\psi(x) = Ae^{-\alpha x} + A'e^{\alpha x}$$

, gde su A i A' proizvoljene konstante. Da bi obezbeili da svojstven afunkcija bude konačna u beskonačnosti, postavićemo A' na nula, pa je konačno rešenje :

$$\psi(x) = Ae^{-\alpha x} \qquad (14.71)$$

Ranije smo napomenuli da moramo obezbediti kontinualnost svojstvene funkcije kao i njenog prvog izvoda u $x = a$. Kontinualnost $\psi(x)$ zahteva da je :

$$C\sin k_0 a = Ae^{-\alpha a} \qquad (14.72)$$

, a kontinualnost prvog izvoda daje :

$$k_0 C\cos k_0 a = -\alpha A e^{-\alpha a} \qquad (14.73)$$

Ako podelimo ove dve jednačine dobijamo :

$$k_0 \operatorname{ctg} k_0 a = -\alpha \qquad (14.74)$$

Ova jednačina postavlja uslove za glatkoću veze na $x = a$ funkcija $C \sin k_0 x$ i $Ae^{-\alpha x}$. To je netrivijalan uslov koji je samo zadovoljen u slučaju kada k_0 i α uzimaju specijalne vrednosti. Jednom kada pronađemo te posebne vrednosti, bićemo u mogućnosti da da pronađemo vezivnu energiju vezanih stanja iz :

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}$$

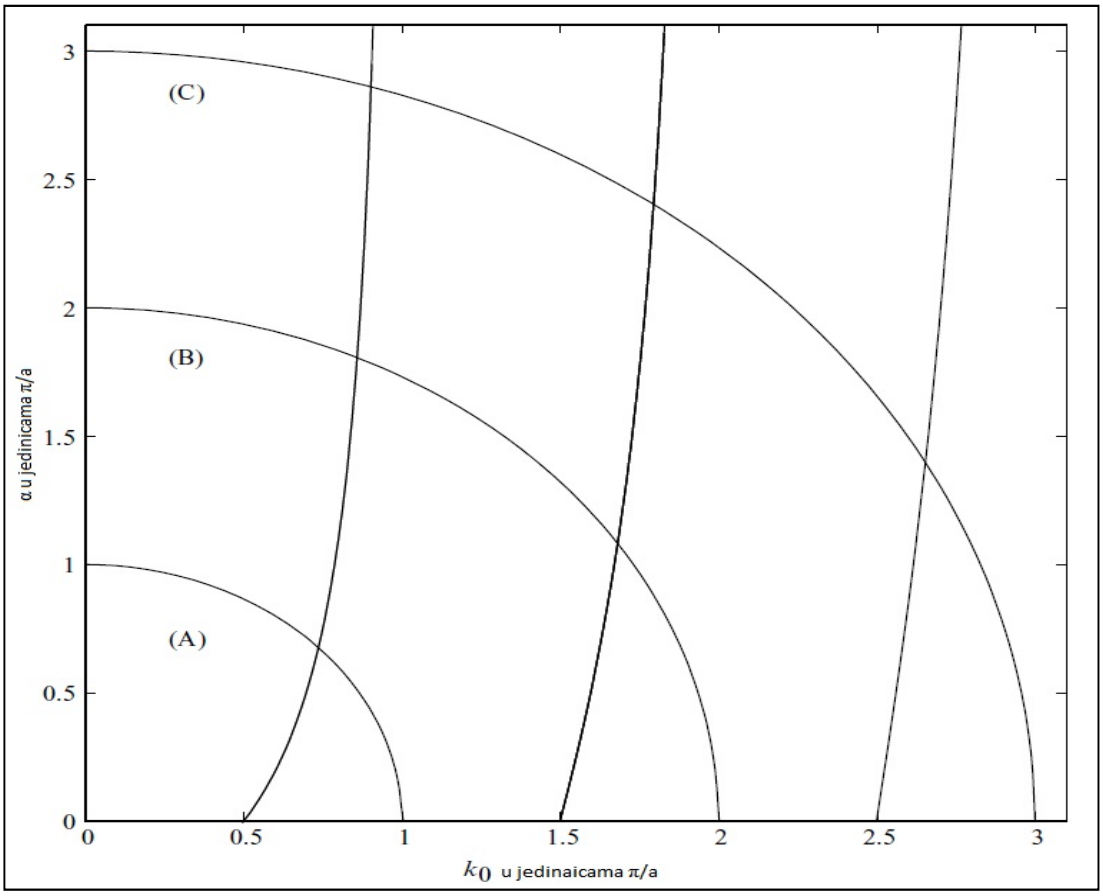
Da bi pronašli ovu energiju treba da primetimo da k_0 i α nisu nezavisni parametri. Oni su definisani sa :

$$E = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \quad i \;\; E = \frac{\hbar^2 {k_0}^2}{2m} - V_0$$

, što daje :

$$\alpha^2 + k_0^2 = w^2, gde\ je\ w\ dato\ sa:\ V_0 = \frac{\hbar^2 w^2}{2m} \qquad (14.75)$$

Dakle, imamo dve jednačine (14.75) i (14.74) koje nam omogućavaju povezivanje parametara. Ove jednačine možemo da rešimo grafički kao presečne tačke funkcija što je prikazano na slici 14.04.



Slika 14.04

Analiza slike 14.04 pokazuje brojne presečne tačke, pa samim tim i brojna vezana stanja i to se sve povećava sa dubinom potencijalne jame. Konkretno, vezana stanja ne postoje za plitku potencijalnu jamu sa :

$$w < \frac{\pi}{2a}$$

Postoji jedno vezano stanje za :

$$\frac{\pi}{2a} < w < \frac{3\pi}{2}a$$

, i dva vezana stanja za :

$$\frac{3\pi}{2a} < w < \frac{5\pi}{2a}$$

, i tako dalje. Da bi ilustrovali prirodu vezanih stanja razmotrićemo potencijal sa dubinskim paramterom $w = \frac{2\pi}{a}$, što odgovara potencijalnoj jami dubine :

$$V_0 = \frac{2\hbar^2\pi^2}{ma^2}$$

U ovom slučaju imamo dva vezana stanja, osnovno stanje i prvo pobuđeno stanje sa vezivnom energijom :

$$\epsilon_1 = 3.26\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\ i\ \epsilon_2 = 1.17\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

Odgovarajuće svojstvene funkcije su prikazane na slici 14.05. Ove svojstvene funkcije pokazuju da se vezana kvantna čestica može pronaći van klasičnog zatvorenog prostora ($0 < x < a$). Specifično, za $x > 0$, vezano stanje svojstvene funkcije ima nenultu vrednost datu sa :

$$\psi(x) = Ae^{-\alpha x}$$

Dakle, raspodela verovatnoće pozicije za vezanu česticu pada eksponencijalno kako se x probija u zabranjeni region kod klasičnog razmatranja. Pošto je parametar α povezan sa vezivnom energijum ϵ preko relacije : $\epsilon = \hbar^2\alpha^2/2m$, stepen kvantnog proboja u klasično zabranjeni region je izraženiji kada je vezivna energija manja.

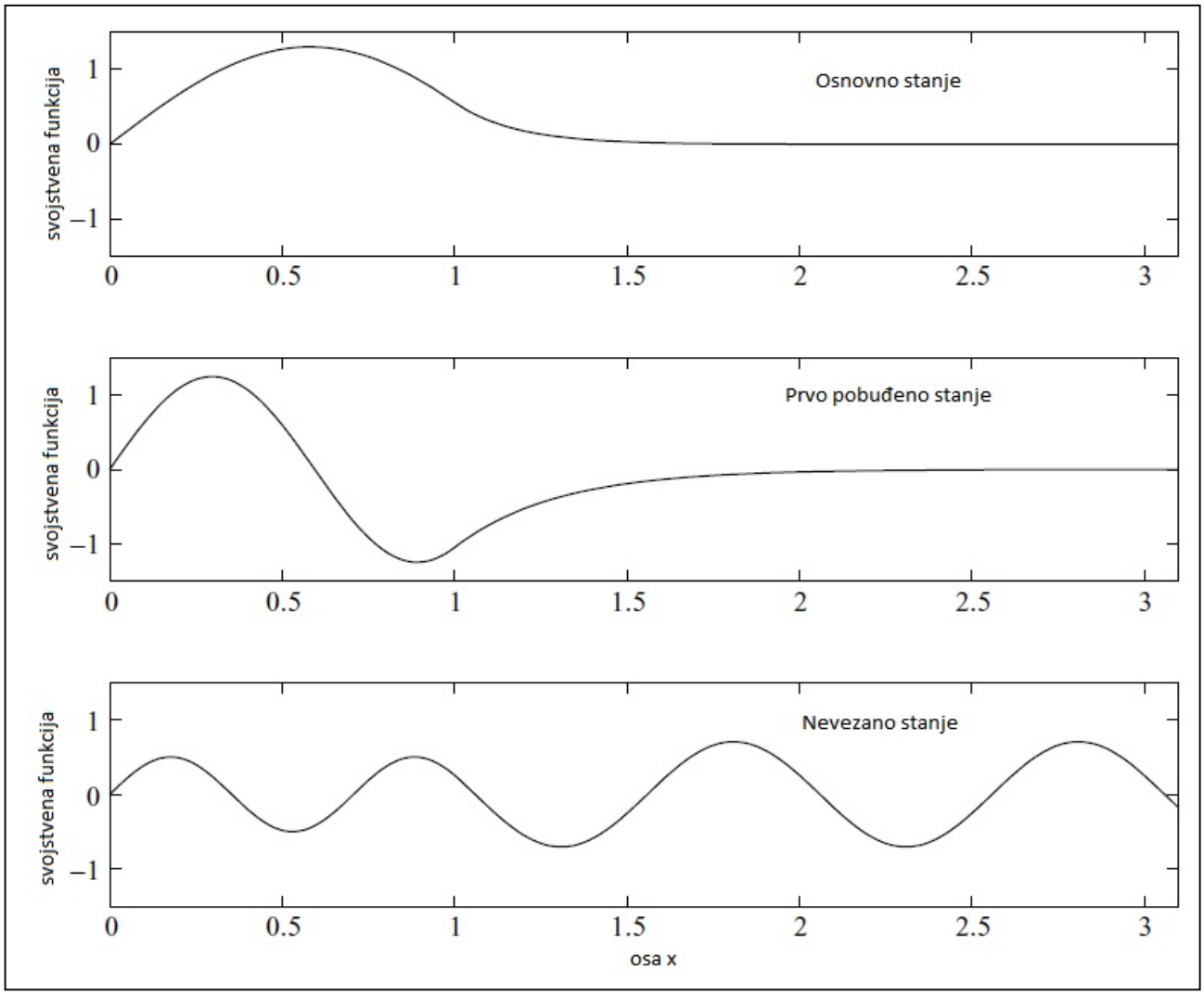
Sada ćemo da razmotrimo česticu sa pozitivnom energijom koja je prišla potencijalnoj jami sa desne strane i posle se reflektovala od $x = 0$. Korisno je napisati energiju čestice kao :

$$E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} - V_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (14.76)$$

, i primetiti da ako se čestica podvrgava zakonima klasične fizike da će njen impuls biti $\hbar k_0$ unutar jame a $\hbar k$ van potencijalne jame.

Ali čestica je u stvarnosti podrvrgnuta zakonima kvantne mehanike. Ima talasnu funkciju u formi :

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$



Slika 14.05 Svojstvene funkcije energije za čestice u potencijalnoj jami sa $a = 1$ i $V_0 = 2\hbar^2\pi^2/ma^2$

I u ovom slučaju ćemo da pronađemo svojstvenu funkciju sledeći proceduru koju smo imali kod vezanih stanja. Ponovo ćemo da pronađemo rešenje jedančine (14.67) u tri regiona na x osi i izjednačiti ih na prelomnim tačkama. Kao i ranije za $x < 0$, svojstvena funkcija je nula zbog beskonačne potencijalne energije u tom regionu. U regionu potencijalne jame $(0 < x < a)$ svojstvena funkcija ima istu formu kao i kod vezanih stanja , dakle :

$$\psi(x) = C \sin k_0 x \qquad (14.77)$$

I na kraju u trećem regionu, gde je potencijalna energija nula, svojstvena funkcija ima formu :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \qquad (14.78)$$

, čije je rešenje :

$$\psi(x) = D \sin(kx + \delta) \qquad (14.79)$$

Konstantu δ zovemo fazni pomak. Isto kao u prethodnom slučaju cilj nam je naći svojstvenu funkciju koja je neprekidna kao i njen izvod u $x = a$. Kontinualnost funkcije $\psi(x)$ daje :

$$C \sin k_0 a = D \sin(ka + \delta) \qquad (14.80)$$

, a kontinualnost izvoda daje :

$$k_0 C \cos k_0 a = kD \cos(ka + \delta) \qquad (14.81)$$

Ako podelimo ove dve jednačine dobijamo :

$$k_0 \operatorname{ctg} k_0 a = k \operatorname{ctg}(ka + \delta) \qquad (14.82)$$

Ove jednačine postavljaju uslove za glatkost prelaza funkcija $C \sin k_0 x$ i $D \sin(kx + \delta)$ na $x = a$. Kada razmatramo analogne jedančine za svojstvene funkcije vezanih stanja, nalazimo da je gladak prelaz jedino moguć kada energija uzima specijalne diskretne vrednosti. Ovo nije slučaj za nevezana stanja. Ovde kada izaberemo bilo koju vrednost energije E, pronalazimo k i k_0 preko (14.76) i koristeći (14.82) nalazimo fazni pomak δ. Dakle za pozitivnu energiju E uvek možemo pronaći svojstvenu funkciju u formi

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 \ , & -\infty < x < 0 \\ C \sin k_0 x \ , & 0 < x < a \\ D \sin(kx + \delta) \ , & a < x < +\infty \end{cases} \qquad (14.83)$$

Primetimo da postoje lelujanja sa talasnim brojevima k_0 i k u regionu gde klasična čestica ima momente $\hbar k_0$ i $\hbar k$. Ova talasanja su ilustrovana slikom 14.05, koja pokazuje svojstvene funkcije za nevezanu česticu sa energijom $E = 2\hbar^2\pi^2/ma^2$ u potencijalnoj jami dubine $V_0 = 2\hbar^2\pi^2/ma^2$. Jedančinu (14.83) možemo prepisati na drugi način da bi nam otkrila reflektovani talas od potencijalnog zida na $x = 0$. Da bi identifikovali incidentu i refleksionu komponentu, napišimo jednačinu preko kompleksnih koeficijenata. Ako uzmemo da je :

$$\sin\theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}$$

, i ako uvedemo dve nove konstante :

$$A_0 = -\frac{C}{2i} \ , \qquad A = -\frac{De^{-2i\delta}}{2i}$$

, dobijamo :

$$\psi(x) = \begin{cases} A_0 e^{-ik_0 x} - A_0 e^{ik_0 x} \ , & 0 < x < a \\ Ae^{-ikx} - Ae^{2i\delta} e^{ikx} \ , & a < x < +\infty \end{cases} \qquad (14.84)$$

Sada možemo identifikovati odbijeni talas koji se kreće natrag i napred sa talasnim brojem k_0 unutar potencijalne jame, i izvan nje, možemo detektovati dolazne i odlazne talase sa talasnim brojem k ali sa fazama pomaknutim za 2δ. Ovi talasi reprezenzentuju čestice impulsa $\hbar k$ reflektovane od potencijalne barijere na $x = a$ i one na $x = 0$. Pošto dolazni i odlazni talas imaju istu amplitudu $|A|^2$, refleksija je

kompletna. Sada će i značenje faznog pomaka postati jasno. Čak i kada koristimo reči kao što su, putovanje unazad, unapred, dolazni ili odlazni, svojstvena funkcija data sa (14.84) opisuje kvantno stanje koje ističe neopservabilnu vremensku zavisnost pošto je to stanje određene energije E. Da bi opisali dinamiku reflektovane čestice na ispravan način, potrebno nam je nestacionarno kvantno stanje neodređene energije. Takvo stanje može biti predstavljeno u regionu $a < x < +\infty$ sa dolazećom grupom talasa u formi :

$$\Psi_i(x,t) = \int_0^{+\infty} c(E')e^{-\frac{i(E't+p'x)}{\hbar}}dE' \ , gde\ je\ E' = \frac{p'^2}{2m}$$

, a odlazeći grupom talasa

$$\Psi_f(x,t) = \int_0^{+\infty} c(E')e^{-i(E't-p'x)/\hbar}e^{2i\delta E'}dE'$$

Funkcija $c(E')$ je verovatnoća amplitude energije , $|c(E')|^2 dE'$ je verovatnoća da čestica ima energiju između E' i E'+dE'. Ako funkcija $|c(E')|^2$ dostiže maksimum za E'=E, grupni talas predstavlja odlazni i dolazni talas čestice energije E, impulsa $p = \sqrt{2mE}$ i brzine $v = p/m$. U ovom slučaju jedino možemo da vidimo da važi :

$$\Psi_i(x,t) \propto F(t + x/v) \quad (14.85)$$

, i

$$\Psi_f(x,t) \propto F\left(t - \frac{x}{v} - 2\hbar d\delta/dE\right) \quad (14.86)$$

, gde funkcija F specificira oblike dolazne i odlazne grupe talasa. Ove jednačine pokazuju da energija zavisna od faznog pomaka, $\delta(E)$, je povezana sa vremenskim kašnjenjem koje se dešava kroz proces refleksije. Ovo kašnjenje aproksimativno iznosi :

$$\tau \approx 2\hbar\frac{d\delta}{dE}$$

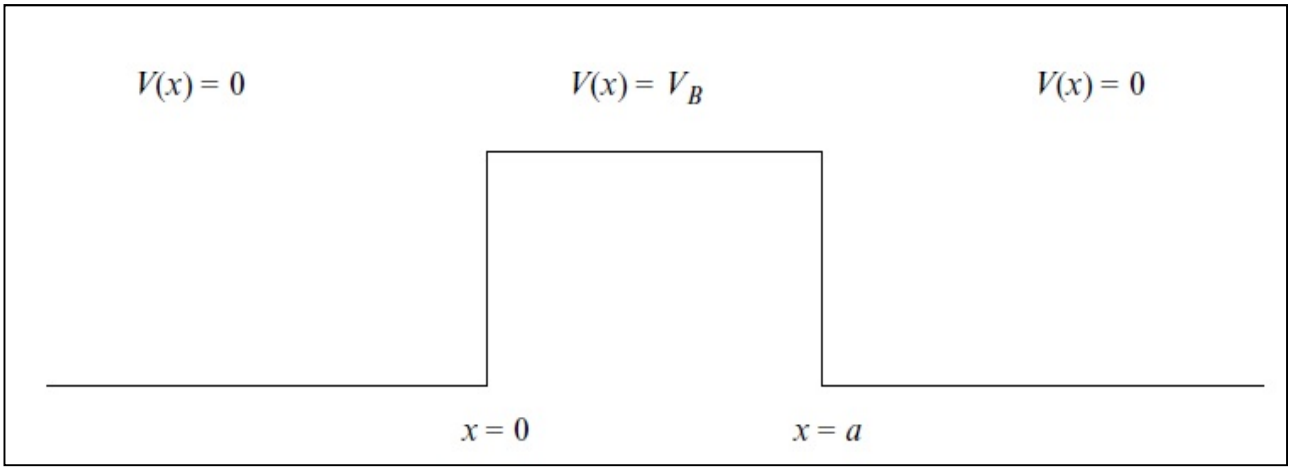
Vreme kašnjenja je negativno za česticu reflektovanu od potencijal kao na slici 14.03 pošto čestica ubrzava kada uđe u potencijalnu jamu na $x = a$.

PROBIJANJE POTENCIJALNE BARIJERE

Prolazak preko i kroz klasično zabranjene zone je jedna od najvažnijih osobina kvantnih čestica. U ovom delu ćemo da pokažemo kako se čestica može probiti kroz potencijalnu barijeru. Da bi sačuvali matematičku jednostavnost koliko god je to moguće razmatraćemo česticu u jednostavnom potencijalnom polju koje možemo predstaviti na sledeći način :

$$V(x) = \begin{cases} 0 \ , -\infty < x < 0 \\ V_B \ , 0 < x < a \\ 0 \ , a < x < +\infty \end{cases} \quad (14.87)$$

, koja je grafički ilustrovana na slici 14.06



Slika 14.06. Potencijalna barijera

Ako se klasična čestica približi barijeri sa leve strane, ona će biti reflektovana ako joj je energija manja od V_B, odnosno transmitovana ako joj je energija veća od V_B. Mi ćemo da vidimo ovde, da ako se kvantna čestica približi barijeri, da je ishod neizvestan, može biti reflektovana ali može biti i transmitovana. Veoma je bitno da kvantna čestica sa manjom energijom od V_B može biti transmitovana a ovde ćemo da nađemo verovatnoću da se to i dogodi. Ponašanje čestice mase m u polju potencijala $V(x)$ je opisano talasnom funkcijom $\Psi(x,t)$ koja je rešenje Šredingerove jednačine :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi \quad (14.88)$$

Da bi opisali dinamiku sistema, neodređenih susreta sa barijerom, naći ćemo talasnu funkciju $\Psi(x,t)$, koja opisuje dolazeću česticu i verovatnoću refleksije i transmisije. Ova talasna funkcija bi trebalo da dovede do toga da dolazni impuls verovatnoće predstavlja česticu koja se približava barijeri pre susreta s njom. Posle susreta postojaće dva impulsa verovatnoće, jedan reperezentuje moguću reflektovanu česticu a drugi transmitovanu. Prema standardnoj interpretaciji talasne funkcije, refleksija i transmisija postoje kao moguće opcije do detekcije čestice. Kada se ovo desi talasna funkcija $\Psi(x,t)$ se urušava i jedna ili druga opcija se realizuje, sa verovatnoćom koja odgovara magnitudi reflektovanog ili transmitovanog impulsa. Ovaj opis dinamike sistema sugeriše da problem treba rešiti u domenu vremenski zavisne kvantne mehanike. Kvantno stanje koje opisuje dolazeću česticu i verovatnoća refleksije i transmisije nisu stacionarna stanja. Kao i stanja tako i stanja neodređene energije predstavljaju linearnu superpoziciju svojstvenih funkcija energije. U ovom slučaju postoji kontinuum mogućih energija i talasna funkcija ima formu

$$\Psi(x,t) = \int c(E')\psi_{E'}(x)e^{-iE't/\hbar}dE'$$

, gde je $\psi_{E'}(x)$ svojstvena funkcija sa energijom E', sa odgovarajućim graničnim uslovima. Funkcija $c(E')$ je verovatnoća amplitude energije, a $|c(E')|^2 dE'$ je verovatnoća da će čestica imati energiju u opsegu E' i $E' + dE'$. Ako funkcija $|c(E')|^2$ ima pik na $E' = E$, funkcija $\Psi(x,t)$ odgovara lokalizovanoj talasnoj grupi i reprezentuje česticu energije E u susretu sa barijerom. Iako je vremenski zavisna kvantna mehanika neophodna za konceptualno razumevanje neodređeneosti susreta čestice sa barijerom, ipak ona nije potrebana za izračunavanje verovatnoće refleksije i transmisije. Ove verovatnoće se dosta jednostavno mogu naći pomoću vremenski nezavisne kvantne mehanike.

Pod uslovom da je neodređenost energije mala u poređenju sa varijacijama u potencijalnoj energiji $V(x)$ možemo izračunati verovatnoće refleksije i transmisije razmatrajući stacionarno stanje određene energije. Takvo stanje je predstavljeno talasnom funkcijom :

$$\Psi(x,t) = \psi_E(x) e^{-iEt/\hbar} \qquad (14.89)$$

, gde je $\psi_E(x)$ svojstvena funkcija sa energijom E koja zadovoljava jednačinu svojstvenih vrednosti :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_E}{dx^2} + V(x)\psi_E = E\psi_E \qquad (14.90)$$

Pošto je priroda potencijala $V(x)$ prikazanog na slici 14.06, jako jednostavna, lako je naći svojstvene funkcije koje opisuju dolazni, reflektovani i transmitovani talas. Procedura je kao i ranije, parcijalno određivanje funkcija i uspostavljanje njihove glatkoće i neprekidnosti na graničnim tačkama. Sa leve strane barijere $V(x)$ je jedanka nuli i svojstvena funkcija $\psi_E(x)$ zadovoljava jednačinu :

$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = -k^2\psi_E\,, \;\; gde\ je\ E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (14.91)$$

Rešenje koje predstavlja incidentni i reflektovani talas amplituda $|A_I|^2$ i $|A_R|^2$ respektivno je :

$$\psi_E(x) = A_I e^{ikx} + A_R e^{-ikx} \qquad (14.92)$$

Oblik svojstvene funkcije unutar barijere zavisi kako od energije iznad tako i energije unutar barijere. Kada je $E > V_B$, region $0 < x < a$ je klasični dozvoljen interval sa svojstvenom funkcijom koja se upravlja prema :

$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = -k_B^2\psi_E \;\; ,gde\ je\ E = \frac{\hbar^2 k_B^2}{2m} + V_B \qquad (14.93)$$

Opšte rešenje uključuje dve proizvoljne konstante i ono je talasne prirode sa talasnim brojevima k_B :

$$\psi_E(x) = Ae^{ik_B x} + A' e^{-ik_B x} \qquad (14.94)$$

Kada je $E < V_B$ region $(0 < x < a)$ je klasično zabranjen region. Ovde je svojstvena funkcija određena sa

$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = \beta^2\psi_E\,, gde\ je\ \; E = -\frac{\hbar^2\beta^2}{2m} + V_B \qquad (14.95)$$

, a njeno opšte rešenje je :

$$\psi_E(x) = Be^{-\beta x} + B'e^{\beta x} \qquad (14.96)$$

, gde su B i B' proizvoljne konstante. Potencijalna energija je opet jednaka nuli sa desne strane barijere. Ovde svojstvena funkcija zadovoljava jednačinu (14.91) i rešenje koje predstavlja transmitovani talas amplitude $|A_T|^2$ je dato sa :

$$\psi_E(x) = A_T e^{ikx}$$

Ako glatko spojimo ova rešenja na $x = 0\ i\ x = a$, pronaći ćemo intezitete reflektovanog i transmitovanog talasa. Konkretno, možemo izvesti izraze za pokazatelje :

$$R = \frac{|A_R|^2}{|A_I|^2} \quad i \quad T = \frac{|A_T|^2}{|A_I|^2} \qquad (14.97)$$

Pošto je verovatnoća pronalaska čestice na x osi proporcionalna $|\psi_E(x)|^2$ ovi odnosi predstavljaju verovatnoće. R je verovatnoća da će se čestica odbiti a T da će se transmitovati. Za ove dve verovatnoće važi da je $R + T = 1$. Sada ćemo da usmerimo našu pažnju na na čestice koje imaju energiju manju od barijere da bi izveli aproksimativne izraze za transmisionu verovatnoću što je korisno kada je barijera široka. Drugim rečima naći ćemo verovatnoću tenelovanja kroz široku barijeru.

TUNELOVANJE

Svojstvena funkcija čestice sa energijom ispode veličine barijere je data sledećom jednačinom :

$$\psi_E(x) = \begin{cases} A_I e^{ikx} + A_R e^{-ikx} & za -\infty < x < 0 \\ Be^{-\beta x} + B'e^{\beta x} & za\ 0 < x < a \\ A_T e^{ikx}, & za\ a < x < +\infty \end{cases} \qquad (14.98)$$

, sa konstantama $A_I, A_R, A_T, B\ i\ B'$ koje obezbeđuju da $\psi_E(x)$ i $d\psi_E/dx$ nisu prekidne na $x = 0,\ x = a$. Kontinualnost na $x = 0$ zahteva :

$$A_I + A_R = B + B' \ \ i \ \ ikA_I - ikA_R = -\beta B + \beta B'$$

, dok kontinualnost na $x = a$ zahteva :

$$Be^{-\beta a} + B'e^{\beta a} = A_T e^{ika} \quad i \quad -\beta Be^{-\beta a} + \beta B'e^{\beta a} = ikA_T e^{ika}$$

Naš cilj je pronaći verovatnoću tunelovanja. Da bi to uradili izrazićemo konstante A_T i A_I u funkciji od B. Prvo, koristimo kontinualnost na $x = 0$ da dobijemo :

$$2ikA_I = -(\beta - ik)B + (\beta + ik)B' \qquad (14.99)$$

Posle toga iskoristimo i uslov kontinualnosti na $x = a$:

$$A_T e^{ika} = \frac{2\beta}{\beta - ik} Be^{-\beta a} \quad i \quad B' = Be^{-2\beta a}\frac{\beta + ik}{\beta - ik} \qquad (14.100)$$

Sada idemo samo pravolinijski do rezultata, izražavanja A_I i A_T preko B, da dobijemo verovatnoću tunelovanja :

$$T = \frac{|A_T|^2}{|A_I|^2} \qquad (14.101)$$

Da bi izbegli algebarsku dosadu, pojednostavićemo stvari tako što ćemo da pretpostavimo da je čestica naišla na široku barijeru tako da je $e^{-2\beta a} \ll 1$. Kada je to slučaj onda je i B' mnogo manje od B pa jednačina (14.99) dobija oblik :

$$2ikA_I \approx -(\beta - ik)B$$

Kombinovanjem ovoga sa (14.100) dobijamo :

$$A_T e^{ika} \approx -\frac{4ik\beta e^{-\beta a}}{(\beta - ik)^2} A_I$$

Ovo znači da je verovatnoća tunelovanja data sa :

$$T \approx \left[\frac{16k^2\beta^2}{(\beta^2 + k^2)^2}\right] e^{-2\beta a}$$

Ako iskoristimo relacije :

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad i \quad \beta = \frac{\sqrt{2m(V_B - E)}}{\hbar}$$

, dobijamo izraz za verovatnoću tunelovanja :

$$T \approx \left[\frac{16E(V_B - E)}{V_B^2}\right] e^{-2\beta a} \qquad (14.102)$$

Dakle, pod uslovom koji smo naveli da je $e^{-2\beta a} \ll 1$, talasnom funkcijom unutar barijere dominira eksponencijalno opadajući član $\beta e^{-\beta x}$, pa je verovatnoća prolaska kroz barijeru širine a proporcionalna sa $e^{2\beta a}$. U stvari, ova eksponencijalna zavisnost faktora prodiranja β i širine potencijalne barijere a je najznačajnija i najkorisnija karakteristika jednačine tunelovanja (14.102). Sada ćemo da ilustrujemo važnost proboja barijere razmatrajući dva procesa. U prvom imamo elektron kao česticu a u drugom proton.

PROBOJ ELEKTRONA

Poznato je iz teorije fotoelektričnog efekta da minimalna energija otrebna za izbacivanje elektrona sa površine metala je reda nekoliko elektronvolti. Ova energija je neophodna zbog toga što elektroni u metalu borave u privlačnom potencijalnom energetskom polju koje se povećava na površini tako da je potencijalni korak za nekoliko elektronvolti veći od energije elektrona sa najvišom energijom u metalu.

Kada se dve metalne površine približe jedna drugoj na dovoljno malu udaljenost, javljaju se dva regiona sa niskim potencijalom i potencijalna barijera slična onoj na slici 14.06. Ali barijera ne sprečava elektrone da se kreću kroz gepove između površina. Elektroni su kvantne čestice koje mogu prolaziti kroz barijeru sa verovatnoćom prolaska datom jednačinom (14.102) ili aproksimativno sa :

$$T \approx e^{-2\beta a} \quad sa\ \beta = \frac{\sqrt{2m_e(V_B - E)}}{\hbar} \qquad (14.103)$$

U ovom izrazu a je širina međuprostora između površina metala, m_e je masa elektrona, V_B je visina barijere na površinama, a E je energija elektrona sa najvišom energijom u metalu. Jednačina (14.103) implicira da je verovatnoća proboja barijere veoma osetljiva na širinu međuprostora između površina metala. Zaista, ako se širina prostora promeni za Δa, odnos promene verovatnoće proboja je dat sa :

$$\frac{\Delta T}{T} = -2\beta\Delta a \qquad (14.104)$$

Kao numerička ilustracija značenje ove formule, razmotrimo tipičnu situaciju u kojoj je 4 eV potrebno da izbace elektron iz metala. Ovo znači da je potencijalna barijera za oko 4 eV veća od energije elektrona pa je parametar proboja β u tom slučaju :

$$\beta = \frac{\sqrt{2m_e(V_B - E)}}{\hbar} \approx 10^{10} m^{-1} \qquad (14.105)$$

Zamenom ove vrednosti u (14.104) možemo ilustrovati neverovatnu osetljivost verovatnoće proboja elektrona. Na primer, dolazi do čak 2% promena u verovatnoći ako se udeljenost površina metala promeni za 0.001 nm. Ova osetljivost elektrona se koristi u uređaju koji se zove mikroskop skeniranja proboja. U ovom uređaju je oštra metalna sonda pozicionirana u blizini površine koju ispitujemo. Udaljenost je podešena da bude dovoljno mala da indukuje tunelski efekat elektrona između sonde i površine, a potencijalna razlika između sonde i površine je takođe postavljena tako da postoji neto struja curenja elektrona u jednom smeru. Kada se sonda premešta ili skenira površinu, površinske osobine atomskih dimenzija će dovesti do merljive promene struje curenja elektrona. Na taj način ova vrsta mikroskopa može napraviti mapu pojedinačnih atoma na površini.

PROBOJ PROTONA

Centar Sunca sadrži jonizovani gas koji se sastoji od elektrona, protona, svetlih jezgara atoma na temperaturi od oko $10^7 K$. Protoni i atomska jezgra se veoma često sudaraju, povremeno se približavaju i povemeno se odbijaj uz oslobađanje energije koja se oslobađa kasnije kao svetlost sa površine kao što je sunčeva. Da bismo razumeli kako se dešava proizvodnja termonuklearne sunčeve energije, izolujmo dva protona koja se približavaju jedan drugom u blizini centra Sunca. Oni se kreću u jonizovanom gasu sa termalnom kinetičkom energijom reda :

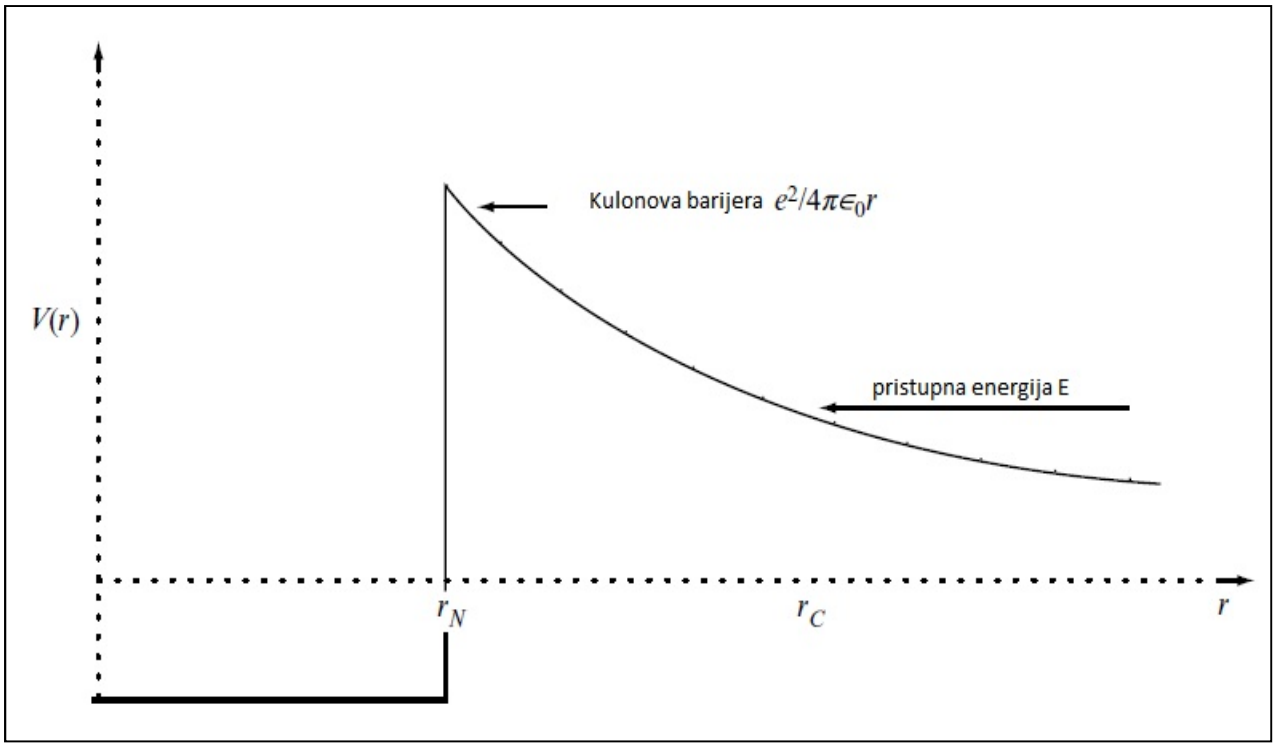
$$E \approx kT \approx 1keV$$

Zajednička potencijalna energija dva protona zavisi od njihove razdvojenosti. Kako je ilustrovano slikom 14.07. potencijalna energija na većim razdaljinama r je dominantna u odnosu na Kulonov odbojni potencijal :

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

Ali na manjim rastojanjima kada r postaje poredivo sa udaljenostima na kojima deluju nuklearne sile koja su veličine $r_N \approx 2 \cdot 10^{-15} m$, potencijalna energija postaje privlačna. Dakle kada se protoni približavaju jedan drugom u centru Sunca, oni to rade sa energijama koje su reda keV, i susreću Kulonovu barijeru reda MeV. Prema klasičnoj fizici postoji jasno definisana distanca najbližeg pristupa r_C data sa

$$E = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_C} \qquad (14.106)$$



Slika 14.07. Šematska prezentacija potencijalne energije dva protona na međusobnoj udaljenosti r.

Pošto je ova distanca za tri reda veličine veća od opsega dejstva nuklearne sile r_N, mogućnost bliskog susreta i mogućnosti za nuklearnu fuziju izgledaju jako maglovito. U stvari, termonuklearna fuzija na Suncu, kao i na drugim zvezdama je jedino i moguća zahvaljujući protonima koji su kvantne čestice koje mogu probiti potencijalnu Kulonovu barijeru. Dva protona sa energijom prilaska E, su opisana sa svojstvenom funkcijom $\psi(r)$, koja se pokorava vremenski nezavisnoj Šredingerovoj jednačini :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(r) = E\psi(r) \qquad (14.107)$$

, gde je $V(r)$ potencijal sa slike 14.07, a $\mu = m_p/2$, redukovana masa protona jer ih posmatramo dva. Za dva protona niske energije, relevantna svojstvena funkcija nije ugaono zavisna i ima formu :

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r} \qquad (14.108)$$

, gde $u(r)$ zadovoljava relaciju :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2} + V(r)u = E \quad (14.108)$$

Nećemo pokušavati da rešimo ovu jednačinu. Umesto toga koristićemo rezultate dobijene za jednodimenzionalnu barijeru da napišemo dovoljno uverljiv oblik svojstvene funkcije i tada proceniti verovatnoću proboja Kulonove barijere. Počnimo sa razmatranjem trodimenzionalne barijere konstantne visine V_B i širine $r_C - r_N$. U ovom slučaju, funkcija $u(r)$ opada eksponencijalno u klasično zabranjenu zonu kako r postaje manje i to je dato sa :

$$u(r) \propto e^{\beta r}$$

, gde je β dato sa :

$$E = -\frac{\hbar^2\beta^2}{2\mu} + V_B$$

Verovatnoća da se proton probije od $r = r_C$ do $r = r_N$ je aproksimativno jednaka odnosu $|u(r_N)|^2$ i $|u(r_C)|^2$ i data je sa :

$$T \approx \left|e^{[-\beta(r_C - r_N)]}\right|^2 \qquad (14.109)$$

Razmotrimo sada barijeru prikazanu na slici 14.07. U ovom slučaju svojstvena funkcija u klasično zabranjenoj zoni je opet aproksimativno data sa :

$$u(r) \propto e^{\beta r}$$

, ali β sada zavisi od r i dato je sa :

$$E = -\frac{\hbar^2\beta^2}{2\mu} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

Verovatnoća da se dva protona probiju od $r = r_c$ do $r = r_N$ je u opštem slučaju data jenačinom (14.109)

$$T \approx \left|e^{\left[-\int_{r_N}^{r_C}\beta dr\right]}\right|^2 \qquad (14.110)$$

Ako pretpostavimo da je $r_C \gg r_N$ i rešimo gornji integral dobijamo :

$$T \approx e^{-\sqrt{E_G/E}} \qquad (14.111)$$

, gde je E relativna energija protona, a E_G je dato sa :

$$E_G = \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^2 2\pi^2\mu c^2 \quad (14.112)$$

Energija E_G se zove energija Gamova i iznosi 493 keV.Sada ćemo da procenimo verovatnoću da dva protona prođu kroz Kulonovu barijeru, koja ih inače zadržava osim u slučaju njihovog sudara u blizini centra Sunca. Ako u jednačinu (14.111) uvrstimo tipičnu termalnu energiju od E=1 keV, dobijamo :

$$T \approx 3 \cdot 10^{-10}$$

Dakle vidimo da je verovatnoća takva da jedan u 30 milijardi protona uspe da pređe Kulonovu barijeru. I kada to urade postoji šansa da se fuzionišu i oslobode termonuklearnu energiju. U praksi se zvezde razvijaju sporo, prilagođavajući svoju temperaturu tako da prosečna toplotna energija jezgre je poprilično ispod Kulonove barijere. Fuzija zatim nastavlja da se odvija sporo, srazmerno verovatnoći probijanja Kulonove barijere pa nuklearno gorivo traje na vremenskoj skali veoma dugo.

HARMONIJSKI OSCILATOR

Harmonijski oscilator je igrao glavnu rolu u razvoju kvantne mehanike. Plank je 1900. godine napravio smelu pretpostavku da se atomi ponašaju slično oscilatorima sa kvantizovanom energijom, kada emituju odnosno apsorbuju zračenje. Ajnštajn je 1905. godine pretpostavio da se elektromagnetno zračenje ponaša na sličan način kao elektromagnetni harmonijski oscilator sa kvantizovanom energijom, a 1907. godine je pretpostavio da se eleastične oscilacije čvrstog tela ponašaju kao sistem mehaničkih oscilatora sa kvantizovanom energijom. Na ove pretpostavke se pozivalo kada se objašnjavalo zračenje crnog tela i fotoelektrični efekat. Nakon toga je kvantna teorija obezbedila osnovni opis obadva harmonijska oscilatora, i mehaničkog i elektromagnetnog.

KLASIČNI OSCILATOR

Najjednostavniji primer harmonijskog oscilatora je čestica na opruzi koja ima konstantu elastičnosti k. Kada se čestica izmesti iz svog ravnotežnog položaja, javlja se sila $F = -kx$ koja deluje u suprotnom smeru i pokušava da vrati česticu na polaznu poziciju. Pošto je za pomeranje čestice iz pozicije x do $x + dx$ potrebno uložiti rad $kxdx$, potencijalna energija koja je sadržana u čestici izmeštenoj na konačnu distancu x je :

$$V(x) = \int_0^x kx'dx' = \frac{1}{2}kx^2 \qquad (15.1)$$

Ova potencijalna energija se konvertuje u kinetičku energiju kada se čestica oslobodi. Jednačina kretanja čestice mase m je :

$$m\frac{d^2x}{dx^2} = -kx \qquad (15.2)$$

, koja se često piše u obliku :

$$\ddot{x} = -\omega^2 x$$

, gde je $\ddot{x}$ ubrzanje čestice, a $\omega = \sqrt{k/m}$. Opšte rešenje jednačine je :

$$x = A\cos(\omega t + \alpha) \qquad (15.3)$$

, gde su A i α dve konstante koje mogu biti određene iz graničnih uslova. Na primer ako je čestica oslobođena iz stanja mirovanja iz pozicije x_0, tada je $A = x_0$ a $\alpha = 0$. Jednačina (15.3) opisuje jednostavne harmonijske oscilacije, amplitude A, faze α i ugaone frekvencije ω, tj perioda $2\pi/\omega$. Tokom kretanja potencijalna energija raste i opada kako kinetička energija opada i raste. Ali ukupna energija koja je zbir potencijalne i kinetičke energije ostaje konstantna i jednaka :

$$E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 \qquad (15.4)$$

U realnom svetu kvantne mehanike jednostavne harmonijske oscilacije, određene energije, frekvencije, faze i amplitude se nikada ne dešavaju. Videćemo da u kvantnoj mehanici oscilatori imaju određenu energiju i ne osciluju ili osciluju sa neodređenom energijom. Međutim, videćemo da pod posebnim okolnostima oscilacije su najsličnije jednostavnim harmonijskim oscilacijama.

KVANTNI OSCILATOR

Definicija osobina kvantnog sistema je njegov Hamiltonijan operator. Za jednodimenzionalni harmonijski oscilator Hamiltonijan je :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad (15.5)$$

Ili

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (15.6)$$

Prvi član reprezentuje kinetičku energiju operatora za česticu mase m a drugi potencijalnu energiju čestice koja će dovesti do jednostavnog harmonijskog kretanja sa ugaonom frekvencijom ω. Ponašanje čestica u harmonijskom oscilatoru je raznovrsnije u kvantnoj fizici nego u klasičnoj fizici. Postoji beskonačan broj kvantnih stanja, neka su stacionarna stanja određene energije, a neka su nestabilna stanja neodređene energije. Svako od ovih stanja je opisano talasnom funkcijom koja zadovoljava Šredingerovu jednačinu :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad (15.7)$$

Kvantna stanja sa konačnom energijom će biti naš prvi problem. Kao što smo videli u prethodnom poglavlju stanja sa energijom E su predstavljena sa talasnom funkcijom u formi :

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (15.8)$$

, gde je $\psi(x)$ pripadajuća svojstvena funkcija energije svojstvene vrednosti E. Ako izraz za $\Psi(x,t)$ uvrstimo u (15.7) i iskoristimo jednačinu (15.6) dobijamo :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right]\psi(x) = E\psi(x) \quad (15.9)$$

Kada nađemo rešenje ove jednačine, nametnućemo fizički uslov da se talasna funkcija čestice može normalizovati. Da bi to uradili zahtevaćemo da svojstvena funkcija teži nuli u beskonačnosti.

$$\psi(x) \to 0 \ , za\ x = \pm\infty$$

Pošto su strane harmonijskog potencijalnog oscilatora poput zidova beskonačnog potencijala očekujemo neograničen broj kvantnih svojstvenih vrednosti. Označićemo ih sa E_n,a odgovarajuće svojstvene funkcije sa $\psi_n(x)$, gde je n kvantni broj. Pratićemo konvenciju u označavanju tako da osnovno stanje odgovara kvantnom broju 0, a prvo, drugo, treće pobuđeno stanje kvantnim brojevima 1,2,3 itd. Pošto u ovom

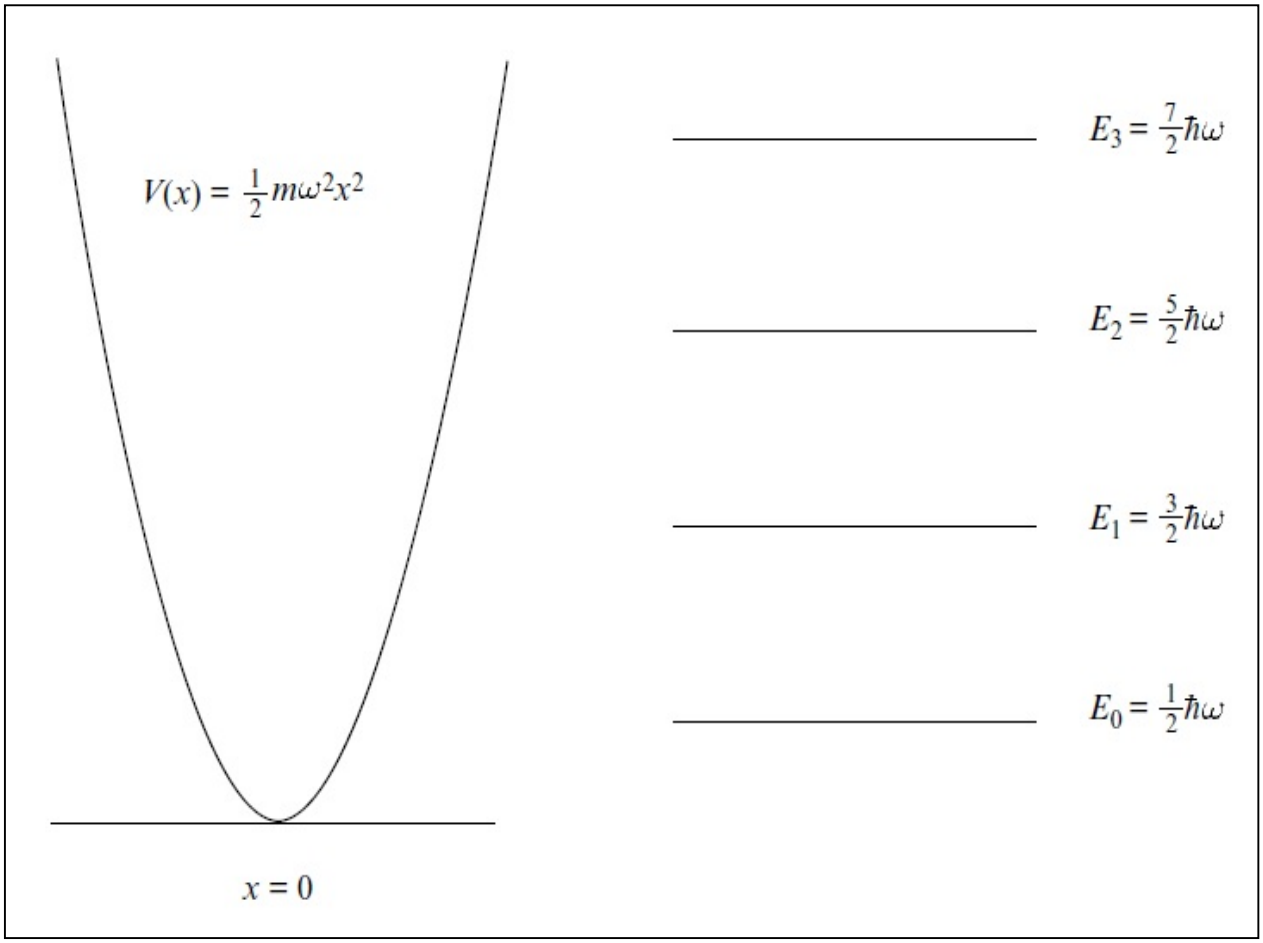
momentu imamo cilj da naglasimo fizičke karakteristike harmonijskog oscilatora, matematiku svojstvenih vrednosti energije i svojstvenih funkcija energije ćemo izvesti kasnije.

KVANTNA STANJA

Svojstvene vednosti energije harmonijskog oscilatora sa klasičnom ugaonom frekvencijom ω su da te sa :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (15.10)$$

Kao što je prikazano na slici 15.01, energetski nivoi imaju jednak razmak $\omega\hbar$ i najniži energetski nivo na $\frac{1}{2}\hbar\omega$



Slika 15.01 Energetski nivoi čestice mase m u harmonijskom potencijalnom oscilatoru

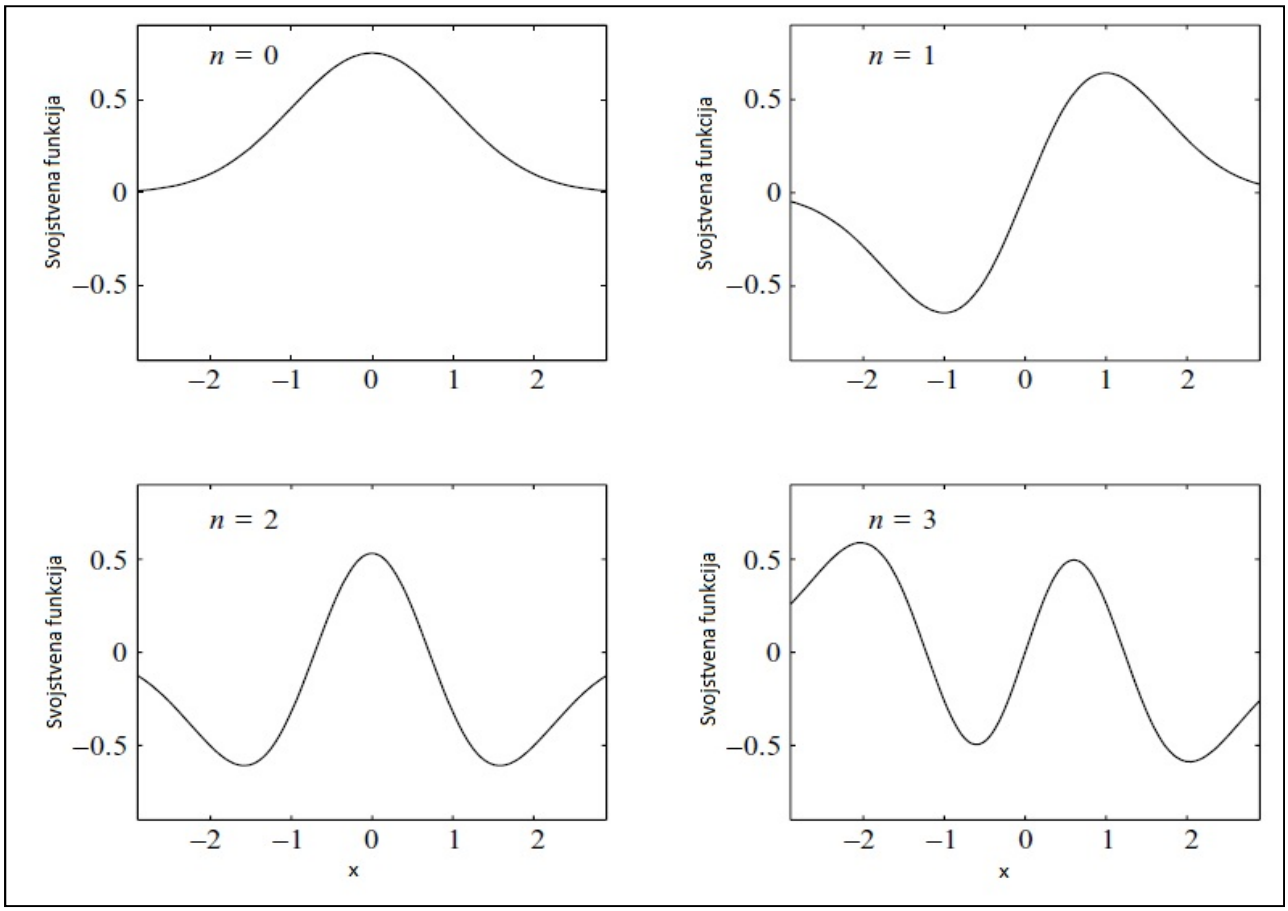
Talasna funkcija čestice energije E ima oblik :

$$\Psi(x,t) = \psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar} \qquad (15.11)$$

, gde je $\psi_n(x)$ svojstvena funkcija energije. Svojstvene funkcije četiri najniža energetska nivoa su date u tabeli 15.01. i prikazane na slici 15.02.

Kvantni broj	Svojstvene vrednosti	Svojstvene funkcije
$n = 0$	$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$	$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{\pi}}}\, e^{-x^2/2a^2}$
$n = 1$	$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$	$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{1}{2a\sqrt{\pi}}}\, 2\frac{x}{a}\, e^{-x^2/2a^2}$
$n = 2$	$E_0 = \frac{5}{2}\hbar\omega$	$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{1}{8a\sqrt{\pi}}}\left[2 - 4\left(\frac{x}{a}\right)^2\right] e^{-x^2/2a^2}$
$n = 3$	$E_0 = \frac{7}{2}\hbar\omega$	$\psi_3(x) = \sqrt{\frac{1}{48a\sqrt{\pi}}}\left[12\frac{x}{a} - 8\left(\frac{x}{a}\right)^3\right] e^{-x^2/2a^2}$

Tabela 15.01



Slika 15.02 Svojstvene funkcije četiri najniža energetska nivoa

Treba primetiti da n-ta svojstvena funkcija ima n nodova, tj postoji n vrednosti x-a za koji je $\psi(x) = 0$. U opštem slučaju svojstvena funkcija pobuđenih graničnih stanja uvek ima broj nodova koji se povećava sa stepenom eksitacije. Opservabilne osobine kvantnih stanja sa energijom E_n uključuju sledeće :

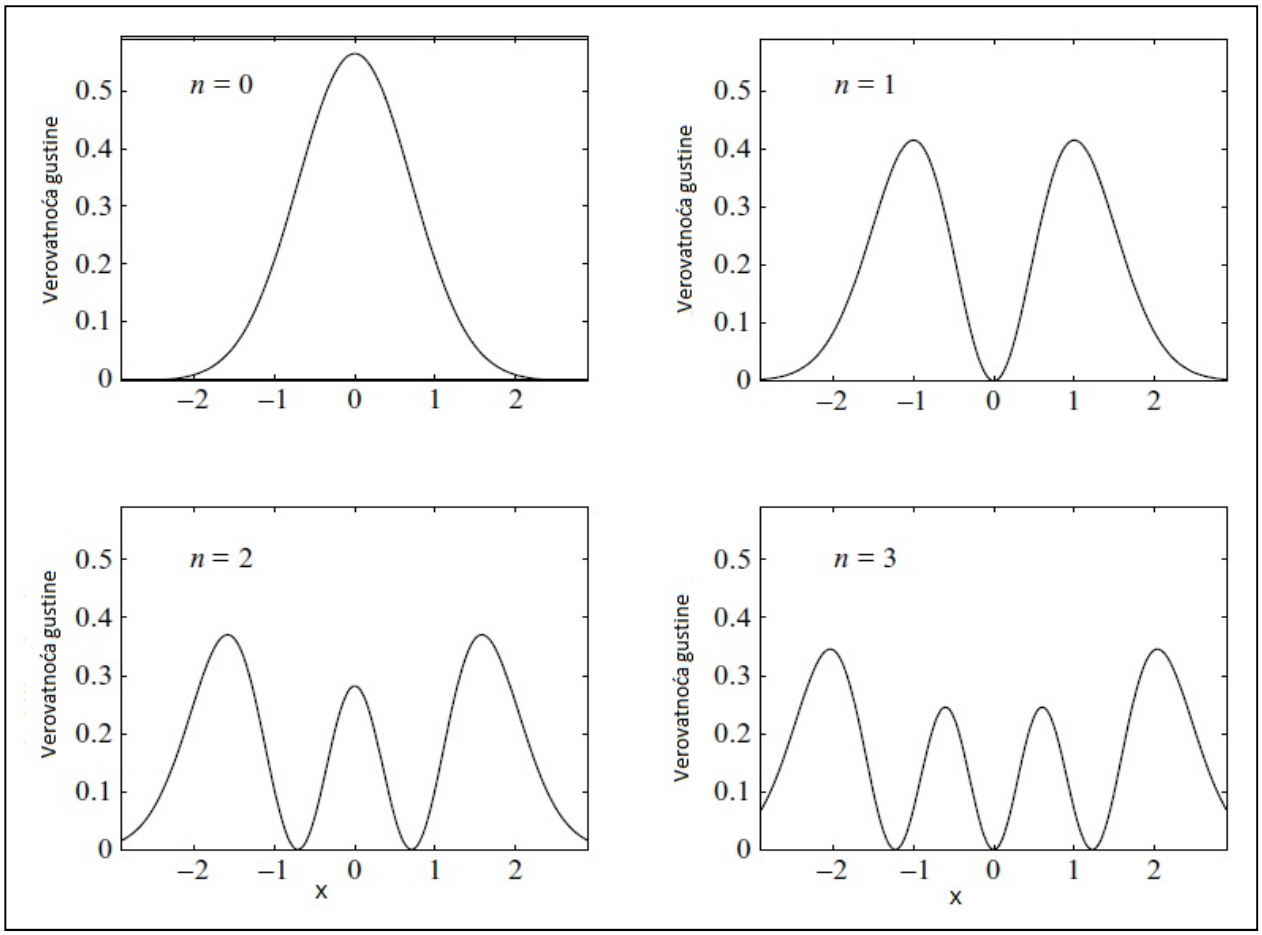
- Svojstvene funkcije imaju opservabilne osobine koje zovemo paritet. Ako se koordinata pozicije promeni sa x na –x, svojstvena funkcija ima određenu simetriju.

$$\psi_n(-x) = +\psi_n(x) \quad , za\ n\ parno$$
$$\psi_n(-x) = -\psi_n(x) \quad , za\ n\ neparno$$

  Za oscilator u stanju sa parnim n se kaže da ima pozitivan paritet, dok za oscilator u stanju sa neparnim n se kaže da ima negativan paritet. Ova osobina proističe iz osobina Hamiltonijana harmonijskog oscilatora koji ostaje nepromenjen pri transformaciji $x \to x' = -x$
- Gustina pozicije čestice

$$|\Psi_n(x,t)|^2 = |\psi_n(x)|^2$$

  , je vremenski nezavisna kao što smo ranije to i pokazali. Kvantna stanja određene energije su stacionarna stanja, tj stanja koja nisu opservabilno vremenski zavisna. Kao što je ilustrovano slikom 15.03 , čestice mogu imati bilo koju lokaciju u opsegu $-\infty < x < +\infty$, nasuprot klasičnim česticama koje su zarobljene u regionu $-A < x < A$, gde je A amplituda oscilacija.



Slika 15.03 Raspodela verovatnoće pozicije za četiri najniža energetska nivoa

- Očekivane vrednosti pozicije su

$$\langle x\rangle = 0 \quad i \quad \langle x^2\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)a^2$$

, pa je neodređenost pozicije

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{\left(n+\frac{1}{2}\right)a}$$

, gde je $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$.

- Očekivane vrednosti impulsa su

$$\langle p\rangle = 0 \quad i \quad \langle p^2\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar^2}{a^2}$$

, pa je neodređenost impulsa

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2} = \sqrt{\left(n+\frac{1}{2}\right)}\frac{\hbar}{a}$$

- Proizvod neodređenosti pozicije i impulsa je :

$$\Delta x \Delta p = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar$$

, što se slaže sa Hajzenbergovim principom neodređenosti, koji tvrdi da je u opštem slučaju

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$$

Primetimo da u slučaju n=0, kada je čestica u osnovnom stanju oscilatora, ovaj proizvod postaje ujedno i najmanji moguć.

- Zbog neodređenosti pozicije i impulsa čestice, neodređene su i potencijalna i kinetička energija. Očekivane vrednosti ovih neodređenosti su:

$$\frac{1}{2}m\omega^2\langle x^2\rangle = \frac{1}{2}E_n \quad i \quad \frac{\langle p^2\rangle}{2m} = \frac{1}{2}E_n$$

Nije nikakvo iznenađenje da je suma neodređenosti potencijalne i kinetičke energije jednaka E_n, ukupnoj jasno definisanoj energiji sistema.

Konačno, jako je korisno razmotriti u opštim crtama zašto je osnovno kvantno stanje harmonijskog oscilatora toliko različto od klasičnog kvantnog stanja u kome se nalazi čestica koja miruje na dnu potencijalne jame sa nultom kinetičkom i potencijalnom energijom. Kada kvantnu česticu precizno lociramo na dnu potencijalne jama tada ona dakle ima najveću neodređenost impulsa a samim tim i najveću kinetičku energiju. I obrnuto, kada je čestica sa precizno izmerenim impulsom koji je jednak nuli, neodređenost njenog položaja je najveća i može se naći u regionu sa najvećom potencijalnom energijom. Sledi da suma kinetičke i potencijalne energije kvantne čestice u harmonijskom potencijalnom oscilatoru ima minimalnu vrednost kada su njen impuls i pozicija neodređeni, ali ne previše neodređeni. Ovaj minimum se zove nulta tačka energije harmonijskog oscilatora.

NESTACIONARNA STANJA

Opšta forma talasne funkcije čestice u harmonijskom potencijalnom oscilatoru ima oblik :

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=0,1,2,\dots} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \qquad (15.12)$$

Ova talasna funkcija reprezentuje stanje neodređene energije zbog toga što pri višestrukom merenju energije može da postoji više različitih ishoda : $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega, E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega, \dots$ sa verovatnoćama $|c_0|^2, |c_1|^2, \dots$. Ova talasna funkcija takođe predstavlja nestacionarno stanje, stanje sa vremenski zavisnim opservabilnim osobinama. Na primer, amplituda verovatnoće položaja $|\Psi(x,t)|^2$ ima vremenski zavisne članove koji nastaju interferencijom članova koji uključuju različite energije svojstvene funkcije $\psi_n(x)$. Konkretno, interferencija članova $\psi_m(x)e^{-iE_m t/\hbar}$ sa $\psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}$ dovodi do člana koji oscilira sa ugaonom frekvencijom :

$$\omega_{m,n} = \frac{|E_m - E_n|}{\hbar} \qquad (15.13)$$

, koja je celobrojni umnožak klasične ugaone frekvencije ω. Dakle, raspodela verovatnoće pozicije, $|\Psi(x,t)|^2$, može oscilovati sa nizom ugaonih frekvencija : ω, 2ω, 3ω ... . Na prvi pogled očekujemo da prosečna pozicija čestice osciluje sa istim frekvencijama, pošto procenom očekivane vrednosti :

$$\langle x(t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t) dx$$

, dobijamo članove oblika

$$c_m^* c_n x_{m,n} e^{i} \omega_{m,n} t \quad , gde\ je\ x_{m,n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x) x \psi_n(x) dx$$

Međutim, većina ovih članova je jednaka nuli, pošto je integral jednak nuli kada je $|m-n| > 1$. Sledi da prosečna pozicija osciluje jedino sa ugaonom frekvencijom ω, i tako čini prosečan impuls. U principu, prosečna pozicija i impuls čestice mase m sa talasnom funkcijom (15.12) su dati sa :

$$\langle x(t)\rangle = A\cos(\omega t + \alpha) \quad i \ \langle p(t)\rangle = -m\omega A \sin(\omega t + \alpha) \qquad (15.14)$$

Dakle, u izvesnoj meri, čestica osciluje napred-nazad kao klasičan oscilator. Ali sličnost sa klasičnim oscilatorom ne može biti veća, jer neodređenost u položaju i impulsu može biti velika i može da se menja kako čestica osciluje napred-nazad. Shodno tome, dobro bi bilo identifiovati kvazi-klasična stanja u kojima je kretanje najsličnije kretanju jednostavnog harmonijskog oscilatora. Može se pokazati da talasna funkcija ovih kvazi-statičkih stanja je data sa (15.12) verovatnoćom amplitude energije c_n, koja zadovoljava Poasonovu raspodelu verovatnoće :

$$|c_n|^2 = \frac{\bar{n}^2}{n!} e^{-\bar{n}}, \qquad za\ n \gg 1 \qquad (15.15)$$

Standardna devijacija energije u kvazi-statičkom stanju je data sa :

$$\langle E\rangle = \left(\bar{n} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad i \ \Delta E = \sqrt{\bar{n}}\hbar\omega \qquad (15.16)$$

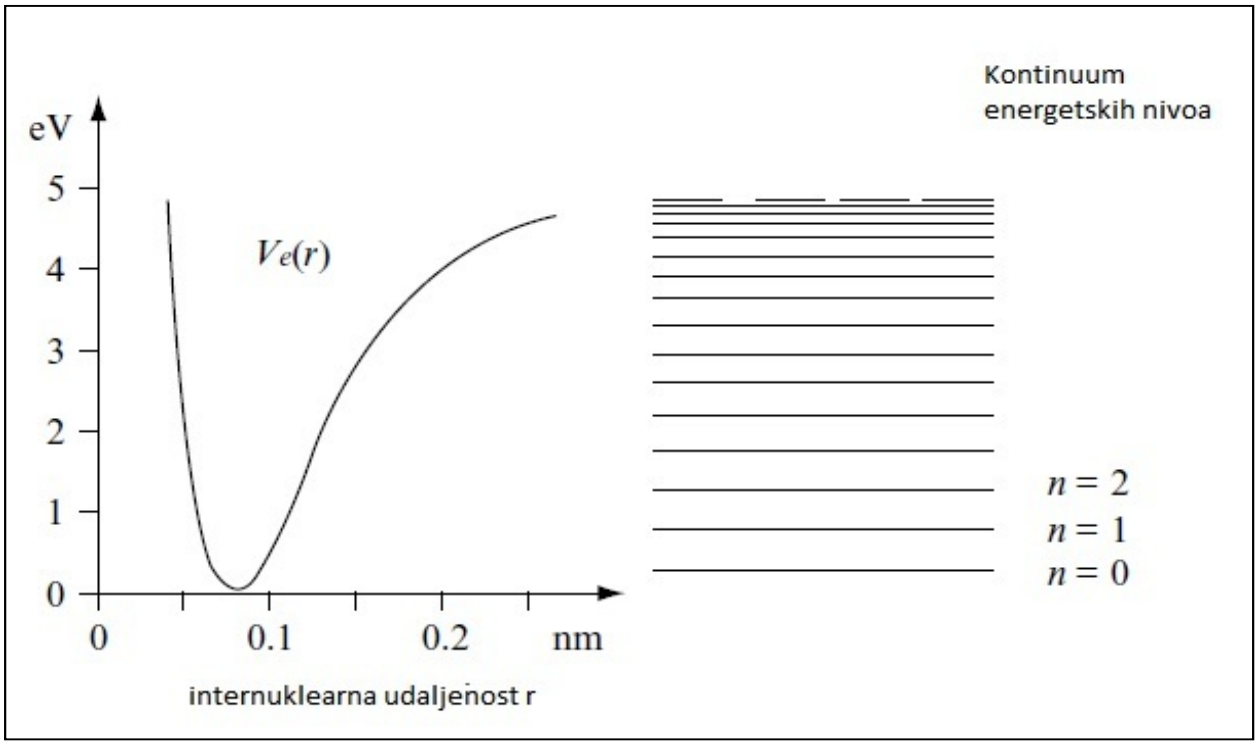
Kada je prosečna pobuđenost velika, relativna neodređenost energije je data sa :

$$\frac{\Delta E}{\langle E \rangle} = \frac{\sqrt{\bar{n}}}{\bar{n} + \frac{1}{2}} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\bar{n}}} \qquad (15.17)$$

, pa neodređenost u energiji postaje manje važna. Pošto neodređenost pozicije i impulsa takođe postaje manje važna kretanje čestice se približava nemogućem savršenstvu klasičnog harmonijskog oscilatora. Na početku 20.veka Plank i Ajnštajn su napravili nadahnute pretpostavke da oscilatori koji ispoljavaju jednostavno harmonijsko kretanje takođe imaju kvantizovanu energiju. Mi smo pratili suprotan trag i pokazali da kvantni oscilator koji ima kvantnu energiju skoro da može ispoljavati jednostavno harmonijsko kretanje.

DVOATOMSKI MOLEKULI

U prvoj aproksimaciji dvoatomski molekul se sastoji od dva jezgra koja zajedno čine efektivni potencijal koji proizilazi iz Kulonove interakcije elektrona i jezgra kao i kvantnog ponašanja elektrona. Ovaj efektivni potencijal određuje snagu molekularne veze i takođe određuje vibracije jezgara. Efektivni potencijal i vibracioni energetski nivoi jednostavnog dvoatomskog molekula, vodonikovog molekula prikazani su na slici 15.04.



Slika 15.04 Efektivni internuklearni potencijal i vibracioni energetski nivoi vodonikovog molekula

Primećujemo sa slike 15.04 da efektivni potencijal dvoatomskog vodonikovog molekula $V_e(r)$ ima minimum i da u blizini tog minimuma imamo oblik kao kod harmonijskog potencijalnog oscilatora. Zaista

ako sa r_0 označimo razdvojenost na kojoj efektivni potencijal ima minimum i sa $x = r - r_0$ ozačimo malo izmeštanje od r_0 možemo pisati :

$$V_e(r) \approx \frac{1}{2}kx^2$$

, gde je k konstanta. Ova formula implicira da kada su jezgra izmeštena za distancu x od njihove ravnotežne udaljenosti r_0, javlja se povratna sila kx, i potencijalna energija raste za $\frac{1}{2}kx^2$. Konstanta k je efektivna konstanta elastičnosti koja karakteriše snagu molekularne veze između jezgara u molekulu. U klasičnoj fizici je važilo da će jezgra imati energiju :

$$E_{cl} = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{1}{2}kx^2$$

, gde su m_1 i m_2 mase jezgara a p_1 i p_2 su magnitude njihovih impulsa. U centru mase sistema, možemo uzeti $p_1 = p_2 = p$ i ako uvedemo redukciju mase :

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

, dobijamo

$$E_{cl} = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}kx^2$$

Ova energija je ista kao i energija čestice mase μ na struni konstante eleastičnosti k. Shodno tome, očekujemo da se vibracije jezgra u dvoatomskom moekulu ponašaju kao harmonijski oscilator klasične frekvencije $\omega = \sqrt{k/\mu}$. Kvanto mehaničko ponašanje ovog oscilatora je opisano talasnom funkcijom $\Psi(x,t)$ koja zadovoljava Šredingerovu jednačinu :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}k^2x^2\right]\Psi \quad (15.18)$$

Ova jednačina je uglavnom identična jedančini (15.7) koju smo imali u opisu ponašanja kvantnog oscilatora. Zaista, ako zamenimo masu m sa redukovanom masom μ, sve dobijene rezultate možemo primeniti na dvoatomski molekul. Ono što je najvažnije možemo da iskoristimo jednačinu (15.10) da zapišemo izraze za vibracione energetske nivoe dvoatomskog molekula redukovane mase μ i konstante elastičnosti k.

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad gde\ \ je\ \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (15.19)$$

Kvantni brojevi mogu uzimati vrednosti 0,1,2,... , ali kada n uzme velike vrednosti model harmonijskog oscilatora se slama. Ovo se dešava kada vibraciona energija ostaje uporediva sa energijom odvajanja molekula kao to se vidi sa slike 15.04. Tranzicija iz jednog vibracionog nivoa na drugi je često praćena

emisijom ili apsorpcijom elektromagnetnog zračenja, najčešće u infracrvenom delu spektra. Ovo je naročito karakteristično za za dvoatomske molekule sa dva različita jezgra. U takvim molekulima elektroni formiraju električne dipole koji mogu emitovati ili apsorbovati elektromagnetno zračenje. Zapravo, ovaj mehanizam dovodi do tranzicije između susednih vibracionih nivoa i emisije ili apsorpcije fotona sa energijom :

$$E = \hbar\sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Ovi fotoni predstavljaju povod za pojavu spektralne linije sa talasnom dužinom:

$$\lambda = \frac{hc}{E} = 2\pi c\sqrt{\frac{\mu}{k}} \qquad (15.20)$$

Na primer razmotrimo molekul ugljen monoksida. Redukovana masa jezgra je $\mu = 6.85\ amu$, pa kada se dešava tranzicija između susednih vibracionih nivoa, emituje se ili apsorbuje infracrvena svetlost talasne dužine $\lambda = 4.6\mu m$. Ako zamenimo ove vrednosti u (15.20) dobićemo konstantu elastičnosti koja karakteriše jačinu veze u molekulu ugljen monoksida, $k = 1908\ Nm^{-1}$. U stvarnosti je situacija mnogo kompleksnija. Pre svega, tranzicija između susednih vibracionih nivoa daje malo različite talasne dužine radijacije pošto su vibracioni nivoi samo aproksimativno jednako udaljeni jedan od drugog. Drugo, molekul može rotirati pa je svaki vibracioni nivo zaista skup blisko razmaknutih nivoa sa različitim rotacionim energijama. Shodno tome postoji opseg spektralnih linija koji je povezan sa svakom vibracionom tranzicijom.

TRODIMENZIONALNI OSCILATOR

Ovo poglavlje ćemo da zaključimo analizom čestice mase m u trodimenzionalnom harmonijskom oscilatoru potencijala :

$$V(r) = \frac{1}{2}kr^2 = \frac{1}{2}k(x^2 + y^2 + z^2) \qquad (15.22)$$

Klasična čestica mase m udaljena za r od koordinatnog početka će iskusiti privlačnu silu magnitude kr. Kada je izmestimo iz centra i oslobodimo ona će izvršavati jednostavne harmonijske oscilacije sa ugaonom frekvencijom $\omega = \sqrt{k/m}$, ali mnogo komplikovanije kretanje će se dešavati ako izmestimo česticu i damo joj neku transverzalnu brzinu. Ponašanjem kvantne čestice upravlja Hamiltonijan $\widehat{H}$ koji predstavlja zbir tri jednodimenzionalna Hamiltonijana

$$\widehat{H} = \widehat{H}_x + \widehat{H}_y + \widehat{H}_z \qquad (15.23)$$

, gde je

$$\widehat{H}_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$\hat{H}_y = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2$$

$$\hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2$$

Stacionarno stanje određene energije je predstavljeno talasnom funkcijom oblika :

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z,t)e^{-iEt/\hbar} \qquad (15.24)$$

, gde $\psi(x,y,z,t)$ zadovoljava trodimenzionalnu jednačinu svojstvenih vrednosti :

$$\hat{H}\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \qquad (15.25)$$

Ova stanja se mogu pronaći koristeći svojstvene funkcije za jednodimenzionalne oscilatore kojima upravljane sa $\hat{H}_x, \hat{H}_y, \hat{H}_z$:

$$\hat{H}_x\psi_{n_x}(x) = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\psi_{n_x}(x)$$

$$\hat{H}_y\psi_{n_y}(y) = \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\psi_{n_y}(y)$$

$$\hat{H}_z\psi_{n_z}(z) = \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\psi_{n_z}(z)$$

, gde kvantni brojevi n_x, n_y, n_z, mogu uzimati vrednosti 0,1,2... . Ove tri jednačine impliciraju da funkcija

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) \qquad (15.26)$$

, zadovoljava trodimenzionalnu jednačinu svojstvenih vrednosti :

$$\hat{H}\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = E_{n_x,n_y,n_z}\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) \quad (15.27)$$

, pod uslovom da je :

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \qquad (15.28)$$

Dakle, svojstvene vrednosti i svojstvene funkcije trodimenzionalnog oscilatora su označene sa tri kvantna broja n_x, n_y, n_z, od kojih svaki može da uzme vrednost od nula do beskonačno. Eksplicitan oblik svojstvenih funkcija nižih nivoa je naveden u tabeli 15.01. Kada su sva tri kvantna broja jednaka nuli imamo jednačinu osnovnog stanja :

$$E_{0,0,0} = \frac{3}{2}\hbar\omega \ , \ \psi_{0,0,0}(x,y,z) = \left(\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\right)^{3/2} e^{-(x^2+y^2+z^2)/2a^2}$$

, gde je $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$. Promenom jednog od kvantnih brojeva sa 0 na 1, dobijamo tri pobuđena stanja istih energija.

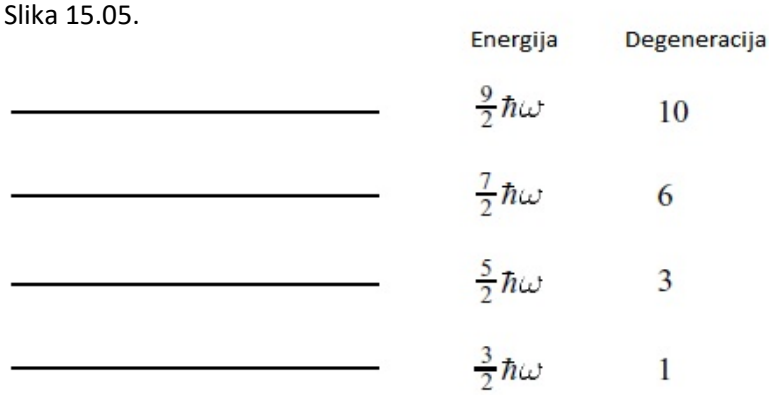
$$E_{1,0,0} = \frac{5}{2}\hbar\omega \quad , \quad \psi_{1,0,0}(x,y,z) = \left(\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\right)^{3/2} 2^{\frac{1}{2}} \left(\frac{x}{a}\right) e^{-(x^2+y^2+z^2)/2a^2}$$

$$E_{0,1,0} = \frac{5}{2}\hbar\omega \quad , \quad \psi_{0,1,0}(x,y,z) = \left(\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\right)^{3/2} 2^{\frac{1}{2}} \left(\frac{y}{a}\right) e^{-(x^2+y^2+z^2)/2a^2}$$

$$E_{0,0,1} = \frac{5}{2}\hbar\omega \quad , \quad \psi_{0,0,1}(x,y,z) = \left(\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\right)^{3/2} 2^{\frac{1}{2}} \left(\frac{z}{a}\right) e^{-(x^2+y^2+z^2)/2a^2}$$

Na sličan načim možemo naći 6 stanja sa energijom $7\hbar\omega/2$, 10 stanja energije $9\hbar\omega/2$ i tako dalje. Energetski nivoi trodimenzionalnog oscilatora su prikazani na slici 15.05.

Slika 15.05.



Ovaj dijagram takođe označava i degeneraciju svakog nivoa. Degeneracija predstavlja broj nezavisnih svojstvenih funkcija povezanih sa svakim nivoom. Ova degeneracija nastaje zato što Hamiltonijan tro-dimenzionalnog oscilatora ima rotacionu i druge simetrije. Slika 15.04.

OPSERVABLE I OPERATORI

Operatori se u kvantnoj mehanici koriste da opisuju opservabilne veličine jer meranja mogu da imaju neizvesne ishode. Ranije smo koristili operatore :

$$\hat{r} = r \;\; i \;\; \hat{p} = -i\hbar\nabla$$

, da izračunamo očekivane vrednosti i neodređenost u položaju i impulsu čestice. Kasnije smo koristili Hamiltonijan operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$$

, da istražimo karakteristike energije čestice. U ovom delu ćemo da razmotrimo detalje četvrtog operatora, operatora koji opisuje osobine ugaonog impulsa čestice

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$$

Ranije smo razvili matematički opis merenja energije baziran na osobinama Hamiltonijan operatora $\hat{H}$. Objasnili smo zašto svojstvena funkcija operatora $\hat{H}$ kojoj pripadaju svojstvene vrednosti E reprezentuje kvantno stanje određene energije E. Takođe smo objasnili zašto svaka talasna funkcija Ψ može biti izražena kao linearna superpozicija svojstvenih funkcija energije. Konkretno kada operator $\hat{H}$ ima samo svojstvenu funkciju ψ_n sa diskretnim svojstvenim vrednostima E_n, svaka talasna funkcija može biti napisana u obliku :

$$\Psi(r,t) = \sum_n c_n \psi_n(r) e^{-iE_n t/\hbar}$$

, gde su koeficijenti c_n verovatnoće amplitude, tako da, ako se meri energija, $|c_n|^2$ predstavlja verovatnoću ishoda E_n. Kada Hamiltonijan dovodi do kontinuuma svojstvenih vrednosti energije, opšta talasna funkcija uključuje integraljenje preko kontinuirane promenjive energije koja označava svojstvene funkcije. Mi ćemo Hamiltonijan $\hat{H}$ koristiti kao prototip za sve operatore koji opisuju opservable u kvantnoj mehanici. Razmatraćemo opštu opservablu A koju opisuje operator $\hat{A}$, obraćajući pažnju na fundamentalne koncepte koje smo opisivali ranije i istaknućemo osnovne matematičke osobine operatora $\hat{A}$. Ovi koncepti su sledeći :

- Operator $\hat{A}$ mora biti linearan. To znači da ako je delovanje operatora $\hat{A}$ na talasne funkcije Ψ_1, Ψ_2, dato sa : $\hat{A}\Psi_1 = \Phi_1$ i $\hat{A}\Psi_2 = \Phi_2$, tada je dejstvo operatora na talasnu funkciju $c_1\Psi_1 + c_c\Psi_2$ sa dve proizvoljne kompleksne konstante je dato sa :

  $$\hat{A}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\Phi_1 + c_2\Psi_2 \quad (16.1)$$

  Ove apstraktne osobine su zadovoljene kod operatora $\hat{H}, \hat{r}, \hat{p}$ i kod svih ostalih koji opisuju opservable u kvantnoj mehanici. Ovo obezbeđuje da su ove opservable u skladu sa principom linearne superpozicije koja tvrdi da je svako kvantno stanje linearna superpozicija drugih kvantnih stanja.
- Operator $\hat{A}$ mora biti Hamiltonijan operator, što znači da se pokorava uslovima :

  $$\int \Psi_1^* \hat{A}\, \Psi_2 d^3r = \int \left(\hat{A}\Psi_1\right)^* \Psi_2 d^3r \quad (16.2)$$

  , gde su Ψ_1 i Ψ_2 bilo koje talasne funkcije. Član u zagradi sa zvezdicom znači da operator $\hat{A}$ jedino deluje na talasnu funkciju Ψ_1, i da se uzima konjugovano kompleksna vrednost rezultata. Ova matematička osobina obezbeđuje da očekivana vrednost opservable bude :

  $$\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi d^3r$$

  , realna za bilo koju talasnu funkciju. Ovo takođe obezbeđuje da svojstvene vrednosti operatora $\hat{A}$ budu realne. Može biti svojstvena funkcija $\psi_{a_n}(r)$ sa diskretnim svojstvenim vrednostima a_n, datim sa :

  $$\hat{A}\psi_{a_n} = a_n \psi_{a_n}$$

  , i/ili svojstvena funkcija $\psi_{a'}$ sa kontinualnim svojstvenim vrednostima a' datim sa :

  $$\hat{A}\psi_{a'} = a'\psi_{a'}$$

  U prethodnom poglavlju smo tvrdili da su mogući ishodi merenja energije, svojstvene vrednosti energije. Identični argumenti ukazuju na to da mogući ishodi merenja opservable A su svojstvene

vednosti operatora $\hat{A}$. Pošto su svi ishodi merenja realni brojevi, svojstvene vrednosti operatora $\hat{A}$ moraju biti realni brojevi.

- Na kraju operator $\hat{A}$ mora opisivati opservablu koja je uvek merljiva. Konkretno, moramo biti u mogućnosti da predvidimo ishode merenja opservable A, kao i verovatnoće svakog od ishoda. Ovo je jedino moguće ako svojstvene funkcije operatora $\hat{A}$ čine potpun set baznih funkcija tako da svaka talasna funkcija $\Psi(r,t)$ može biti napisana u obliku :

$$\Psi(r,t) = \sum_n c_{a_n}(t)\psi_{a_n}(r) + \int c(a',t)\,\psi_{a'}(r)da' \quad (16.3)$$

U ovom izrazu $c_{a_n}(t)$ i $c(a',t)$ su verovatnoće amplitude za opservablu A. Ako se merenje dešava u vremenu t, na čestici sa talasnom funkcijom Ψ, tada$\left|c_{a_n}(t)\right|^2$ je verovatnoća ishoda a_n, a $|c(a',t)|^2 da'$ je verovatnoća da će ishod biti između a' i $a' + da'$.

POLOŽAJ I IMPULS

U prethodnim poglavljima smo uveli operatore za poziciju i impuls, i pokazali kako se oni koriste za izračunavanje očekivanih vrednosti i neodređenosti, ali nismo eksplicitno razmatrali svojstvene vrednosti i svojstvene funkcije ovih operatora. Ovde ćemo to učiniti tako to ćemo da posmatramo česticu koja se kreće u jednoj dimenziji. Označićemo svojstvenu funkciju čestice, sa svojstvenom pozicionom vrednošću x' , sa $\psi_{x'}(x)$, a svojstvenu funkciju za česticu sa svojstvenom vrednošću impulsa p' , sa $\psi_{p'}(x)$.

SVOJSTVENA FUNKCIJA POZICIJE

Svojstvena jednačina pozicije zadovoljava jednačinu svojstvenih vrednosti :

$$\hat{x}\psi_{x'}(x) = x'\psi_{x'}(x) \quad (16.4)$$

, koju imajući u vidu da je $\hat{x} = x$ možemo napisati i u obliku

$$x\psi_{x'}(x) = x'\psi_{x'}(x) \quad (16.5)$$

Ova jednačina ovako napisana, je moguća samo u slučaju da je $\psi_{x'}(x)$ veoma čudna funkcija sa beskonačnim pikom u $x = x'$. Takva funkcija se obično piše u obliku :

$$\psi_{x'}(x) = \delta(x - x') \quad (16.6)$$

, gde je $\delta(x - x')$ Dirakova Delta funkcija. Dirakova delta funkcija se može smatrati graničnim slučajem većine ponatih funkcija. Na primer funkcija :

$$\delta_\epsilon(x - x') = \begin{cases} \frac{1}{2\epsilon} & za\ |x - x'| < \epsilon \\ 0 & za\ \ |x - x'| > \epsilon \end{cases}$$

, se ponaša slično Dirakovoj delta funkciji pošto postaje sve uža i viša kako $\epsilon \to 0$. U stvari, definicija osobina Dirakove delta funkcije je da, za svaku funkciju važi :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\delta(x-x')dx = f(x') \qquad (16.7)$$

Ova definicija je zadovoljena za $\delta_\epsilon(x-x')$ za $\epsilon \to 0$, zato što kada uzmemo u obzir ovo ograničenje, funkcija postaje sve veća i veća u blizini $x = x'$ a površina koju zaklapa teži jednici. Svojstvena funkcija pozicije, slično onima za bilo koju drugu opservablu, formira kompletan set baznih funkcija. Konkretno, bilo koja talasna funkcija $\Psi(x,t)$ može biti napisana u obliku :

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(x',t)\psi_{x'}(x)dx' \qquad (16.8)$$

, gde je $c(x',t)$ verovatnoća amplitude pozicije, tj $|c(x',t)|^2 dx'$ je verovatnoća pronalaska čestice između x' i x'+dx' u trenutku t. Ako iskoristimo jednačinu (16.6) nalazimo da je :

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(x',t)\,\delta(x'-x)dx' = c(x,t)$$

Ova jednačina potvrđuje pretpostavku koju smo ranije uveli da talasna funkcija $\Psi(x,t)$ predstavlja verovatnoću amplitude za poziciju.

SVOJSTVENA FUNKCIJA IMPULSA

Svojstvena funkcija čestice sa svojstvenom vrednošću impulsa p', $\psi_{p'}(x)$, zadovoljava jednačinu :

$$\hat{p}\psi_{p'}(x) = p'\,\psi_{p'}(x) \qquad (16.9)$$

, koju možemo napisati, koristeći izraz $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ na sledeći način :

$$-i\hbar\frac{\partial\psi_{p'}(x)}{\partial x} = p'\psi_{p'}(x) \qquad (16.10)$$

, koja ima rešenje u obliku :

$$\psi_{p'}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ip'x/\hbar} \qquad (16.11)$$

Kao što smo i očekivali, svojstvena funkcija sa impulsom p' je ravni talas, sa talasnim brojem $k' = p'/\hbar$ i sa talasnom dužinom $\lambda' = h/p'$. Konstanta $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ je korisna konvencija koja osigurava da se svojstvene funkcije impulsa i pozicije pokoravaju sličnim normalizacionim uslovima. Pošto svojstvena funkcija impulsa formira kompletan set baznih funkcija svaka talasna funkcija može biti napisana u obliku :

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p',t)\psi_{p'}(x)dp' \qquad (16.12)$$

, gde je funkcija $c(p',t)$ verovatnoća amplitude impulsa, dok je $|c(p',t)|^2 dp'$ verovatnoća da će izmereni impuls čestice u trenutku t biti između p' i p'+dp'. Ako iskoristimo jednačinu (16.11) dobijamo :

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(p',t) e^{ip't/\hbar}\, dp' \qquad (16.13)$$

, koja i pored razlika u notaciji , je identična relaciji :

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \widetilde{\Psi}(p,t) e^{ipx/\hbar}\, dp$$

, koja je uvedena u ranijim poglavljima kada smo pravili pretpostavku da Furieova transformacija talasne funkcije $\widetilde{\Psi}(p,t)$ je verovatnoća amplitude impulsa. Sada vidimo da je ta pretpostavka bila ispravna.

Normalizacija delta funkcije

Problem normalizacije svojstvenih funkcija impulsa i pozicije se javlja zato što obadve imaju kontinualne svojstvene vrednosti. Ako jednačinu (16.6) iskoristimo zajedno sa definicijom Dirakove delta funkcije, onda jednačina (16.7) daje :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{x'}^*(x) \psi_{x''}(x) dx = \delta(x' - x'') \qquad (16.14)$$

Pošto je delta funkcija jednaka nuli za $x' \neq x''$ i beskonačna za $x' = x''$, zaključujemo da svojstvene funkcije pozicije su međusobno ortogonalne ali da ne mogu biti normalizovane na jedinicu. Na sličan način, koristeći Furieove transformacione tehnike, može se pokazati da svojstvene funkcije impulsa zadovoljavaju uslov :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{p'}^*(x) \psi_{p''}(x) dx = \delta(p' - p'') \qquad (16.15)$$

Dakle, svojstvene funkcije impulsa su takođe međusnobno ortogonalne ali ne mogu biti normalizovane na jedinicu. Prisetimo se da talasna funkcija mora biti normalizovana na jedinicu ako opisuje česticu koja se uvek može negde naći. Stoga, striktno govoreći svojstvene funkcije date sa (16.6) i (16.11) ne mogu biti korišćene da opišu fizički prihvatljive talasne funkcije. Međutim normalizovana talasna funkcija može biti formirana koristeći linearnu superpoziciju ovih svojstvenih funkcija, pa su ove talasne funkcije grupa talasa koja se može koristiti za opisivanje čestica sa veoma malim neodređenostima u položaju i impulsu. Konačno, treba imati na umu da se upotreba delta funkcija može izbeći zamišljanjem čestice u kutiji velikih dimenzija. Kada se usvoji ovaj pristup, normalizacija svojstvenih funkcija impulsa i položaja može biti napravljena.

Kompatibilne opservable

U klasičnoj fizici je moguće u principu, da imamo precizne informacije o svim opservabilnim osobinama sistema u svakom trenutku vremena. Na primer, specificirane vrednosti položaja ili impulsa čestice se mogu iskoristiti da se pronađu vrednosti bilo koje druge dinamičke opservable. Mi sada znamo da sveobuhvatna preciznost klasične fizike ne može biti primenjena na česticu, pošto merenja predstavljaju aktivnosti koje utiču na sistem. Shodno tome, kvantna kretanja mogu biti specificirana podacima koji bi se

u klasičnoj fizici smatrali ograničenim i nedovoljno preciznim. Ako želimo preciznost u kvantnoj mehanici moramo da izaberemo podskup opservabli koje možemo odrediti bez međusobnog preplitanja ili kontradikcija. Takve opservable, zovemo kompatibilnim opservablama. Kada je specificiran kompletan set kompatibilnih opservabli, u principu možemo napisati talasnu funkciju koja kompletno opisuje kvantno stanje. Sve informacije o kompletu opservabli i sve informacije o verovatnoćama za neodređene vrednosti drugih opservabli će biti sadržane u toj funkciji. Da bi ilustrovali ovu ideju, prvo ćemo da posmatramo česticu koja se kreće u jednoj a kasnije i u tri dimenzije. Klasično stanje čestice u jednoj dimenziji može biti opisano sa dve opservable, sa pozicijom i impulsom. Nasuprot tome, kvantno stanje čestice u jednoj dimenziji je precizno opisano ako imamo jednu opservablu precizno definisanu. Takođe se može definisati precizno i energija. Takvo stanje je posebno korisno jer predstavlja stacionarno stanje, bez vremenske zavisnosti svojstava opservable. Za česticu koja se kreće u tri dimenzije potrebno je definisati više opservabli. Klasično stanje je definisano sa šest opservabli, tri pozicione koordinate i tri komponente impulsa, ali kvantno stanje može biti precizno definisano sa samo tri precizno određene opservable. Međutim, pošto je stanje tačno određene energije stacionarno stanje, često je najkorisnije specificirati energiju i dve druge opservable.

Komutatori

Uloga kompatibilnih i nekompatibilnih opservabli u kvantnoj mehanici može biti napravljena jasnijom ako uvedemo matematički koncept komutatora dva operatora. Komutator između dva operatora $\hat{A}$ i $\hat{B}$ je definisan sa :

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (16.16)$$

Ovo je koristan koncept u matematici operatora zato što, kao što ćemo pokazati, redosled kojim dva operatora deluju na funkciju je važan. To je važan koncept u kvantnoj fizici zato što se može iskoristiti za određivanje kompatibilnosti opservabli. Mi ćemo pokazati da su dve opservable A i B, nekompatibilne ako važi :

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$$

, odnosno da su kompatibilne ako je ovaj izraz jednak nuli. Ovaj opšti kocept se najbolje razume ako posmatramo stanje čestice u jednoj i tri dimenzije.

Čestica u jednoj dimenziji

Možemo proceniti komutator za operatore impulsa i pozicije za česticu u jednoj dimenziji ako posmatramo relaciju :

$$(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\Psi(x,t)$$

, gde je $\Psi(x,t)$ bilo koja talasna funkcija čestice. Ovaj izraz nije jednak nuli zato što je redosled $\hat{x}$ i $\hat{p}$ značajan. Konkretno, imamo :

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

, i

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

, tako da :

$$(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\Psi(x,t) = i\hbar\Psi(x,t) \quad (16.17)$$

, jer je ovo istinito za svaku talasnu funkciju $\Psi(x,t)$, odakle možemo zaključiti da operacija definisana sa $(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})$ predstavlja uvek množenje sa faktorom $i\hbar$. Ukratko, zaključili smo da je komutator :

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \qquad (16.18)$$

Ova relacija je toliko važna u kvantnoj mehanici da se zove kanonska komutaciona relacija. Fizičko značenje kanonske komutacione relacije možemo otkriti ako pretpostavimo nemoguće : Istovremeno postojanje svojstvene funkcije pozicije i impulsa $\psi_{x'p'}(x)$ zadovoljava jednačinu svojstvenih vrednosti :

$$\hat{x}\psi_{x'p'}(x) = x'\psi_{x'p'}(x) \quad i \quad \hat{p}\psi_{x'p'}(x) = p'\psi_{x'p'}(x) \quad (16.19)$$

Takve svojstvene funkcije, ako postoje, bi reprezentovale kvantno stanje sa jasno definisanom pozicijom i impulsom. Razmotrimo uticaj komutatora za $\hat{x}$ i $\hat{p}$ na ovu hipotetičku istovremenu svojstvenu funkciju. Ako iskoristimo jednačinu svojstvenih vrednosti (16.19) dobijamo :

$$[\hat{x},\hat{p}]\psi_{x'p'}(x) = (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\psi_{x'p'}(x) = (x'p' - p'x')\psi_{x'p'}(x) = 0$$

Međutim, kao što smo videli kod kanonske komutacione relacije važi da je :

$$[\hat{x},\hat{p}]\psi_{x'p'}(x) = i\hbar\psi_{x'p'}(x)$$

Iz ova dva rezultata proizilazi da je $i\hbar\psi_{x'p'}(x) = 0$. Dakle imamo pretpostavku o postojanju isotvremene svojstvene funkcije poožaja i impulsa koja prema onome što smo pokazali mora biti nula za svako x. Drugim rečima, opet smo pokazali da kvantno stanje sa određenim položajem i impulsom ne može da postoji. Naglasili smo da matematički osnov za nepostojanja takvog stanja pa samim tim i nekompatibilnosti pozicije i impulsa je da komutator za $\hat{x}$ i $\hat{p}$ nije nula. Štaviše , stepen nekompatibilnosti pozicije i impulsa izražen preko Hajzenbergovog principa neodređenosti može biti izveden korišćenjem kanonske komutacione relacije. Ključni koraci u izvođenja Hajzenbergovog principa neodređenosti su sledeći : Kvadrati neodređenosti ili varijanse u poziciji i impulsu čestice sa normalizovanom talasnom funkcijom $\Psi(x,t)$ su dati sa :

$$(\Delta x)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\left(\widehat{\Delta x}\right)^2\Psi dx \quad i \quad (\Delta p)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\left(\widehat{\Delta p}\right)^2\Psi dx$$

, gde su operatori $\widehat{\Delta x}$ i $\widehat{\Delta p}$ dati sa :

$$\widehat{\Delta x} \equiv \hat{x} - \langle x\rangle \quad i \quad \widehat{\Delta p} \equiv \hat{p} - \langle p\rangle$$

Koristeći kanonsku komutacionu relaciju lako možemo pokazati da ova dva operatora zadovoljavaju komutacionu relaciju :

$$\left[\widehat{\Delta x}, \widehat{\Delta p}\right] = i\hbar \quad (16.20)$$

Na kraju se dobija :

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \frac{1}{4}\left|\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left[\widehat{\Delta x}, \widehat{\Delta p}\right] \Psi dx\right|^2$$

, koja se može pojednostaviti koristeći (16.20) i normalizacione uslove za talasnu funkciju Ψ. Dakle :

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

, ili

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Dakle Hajzenbergov princip neodređenosti koji smo uveli u samom startu ove oblasti, kada smo ilustrovali inherentnu neodređenost u vezi s merenjem položaja i impulsa čestice, može se izvesti pod pretpostavkom da položaj, odnosno impuls opservable se mogu opisati operatorima koji se pokoravaju kanonskoj komutacionoj relaciji.

ČESTICA U TRI DIMENZIJE

Kroz razmatranja kretanja čestice u tri dimenzije ilustrovaćemo vezu između komutatora i kompatibilnih opservabli. U ovom slučaju kvantno stanje je definisano specificiranjem tri kompatibilne opservable koje su opisane sa tri operatora koji komutiraju jedni s drugima. Na primer možemo izabrati x, y koordinate položaja i z komponentu impulsa čestice da definišemo kvantno stanje. Ove opservable su definisane operatorima :

$$\hat{x} = x\,, \hat{y} = y, \qquad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

Lako je pokazati da bilo koji od ovih operatora komtiraju :

$$\hat{x}\hat{p}_z\Psi = x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)\Psi = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial z}\Psi$$

, ili

$$\hat{p}_z\hat{x}\Psi = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)x\Psi = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial z}\Psi$$

Dakle, imamo tri komutativna operatora :

$$[\hat{x},\hat{y}] = [\hat{x},\hat{p}_z] = [\hat{y},\hat{p}_z] = 0$$

, istovremnu svojstvenu funkciju u obliku :

$$\psi_{x'y'p_z'}(x,y,z) = \delta(x-x')\delta(y-y')\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ip_z'z}$$

Štaviše, svaka talasna funkcija $\Psi(x,y,z,t)$ može biti izražena kao linearna superpozicija ovih svojstvenih funkcija kao što se vidi iz jednačine :

$$\Psi(x,y,z,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} dy' \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z'\, c(x',y',z',t)\, \psi_{x'y'p_z'}(x,y,z)$$

U ovom izrazu $c(x',y',z',t)$ je verovatnoća amplitude za tri kompatibilne opservable. U stvari verovatnoća lokalizacije čestice u trenutku t između x' i $x'+dx'i$ y' i $y'+dy'$ sa impulsom u smeru z ose između p_z' i $p_z'+dp_z'$ je $|c(x',y',p_z',t)|^2 dx'dy'dp_z'$. Ovaj primer je ilustracija opšte procedure definisanja kvantnog stanja čestice koja se kreće u tri dimenzije sa specificiranim setom od tri kompatibilne opservable.

Konstante kretanja

Opservable koje su kompatibilne sa energijom imaju poseban značaj. One su konstante kretanja. Da otkrijemo značenje ovog izraza, razmotrimo očekivanu vrednost opservable A za česticu sa talasnom funkcijom Ψ :

$$\langle A(t)\rangle = \int \Psi^* \hat{A}\Psi d^3r \quad (16.21)$$

U principu, očekivana vrednost $\langle A(t)\rangle$ će varirati u vremenu kako talasna funkcija $\Psi(r,t)$, opada i teče u skladu sa Šredingerovom jednačinom :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad (16.22)$$

Naći ćemo brzinu promene $\langle A(t)\rangle$ diferenciranjem obe strane jednačine (16.21).

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \int \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\hat{A}\Psi d^3r + \int \Psi^*\hat{A}\frac{\partial\Psi}{\partial t}d^3r$$

Ako iskoristimo Šredingerovu jednačinu (16.22) i njenu konjugovano kompleksnu predstavu imamo :

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = -\frac{1}{i\hbar}\int (\hat{H}\Psi^*)\hat{A}\,\Psi d^3r + \frac{1}{i\hbar}\int \Psi^*\hat{A}\,(\hat{H}\Psi)d^3r$$

Pošto Hamiltonijan $\hat{H}$, slično kao i drugi operatori za opservable u kvantnoj mehanici je Hermitian operator možemo iskoristiti (16.2) da pokažemo da je :

$$\int (\hat{H}\Psi^*)\hat{A}\Psi d^3r = \int \Psi^* \hat{H}\hat{A}\Psi d^3r$$

, pa na osnovu toga možemo ponovo napisati jedančinu za promenu očekivane vrednosti kao :

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\int \Psi^*[\hat{A},\hat{H}]\Psi d^3r \quad (16.22)$$

Ova jednačina se može iskoristiti za određivanje vremenske zavisnosti očekivane vrednosti bilo koje opservable. Za opservablu A koja je kompatibilna sa energijom, komutator $[\hat{A},\hat{H}]$ je nula pa jednačina (16.22) ima oblik : $\frac{d\langle A\rangle}{dt} = 0$

Takva opservabla se naziva konstanta kretanja zato što njena očekivana vednost ne zavisi od promene talasne funkcije u vemenu. Ova ideja može biti ilustrovana posmatranjem čestice sa Hamiltonijanom :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$$

, gde je V(r) potencijalna energija čestice koja samo zavisi od r. Za ovaj Hamiltonijan je lako pokazati :

$$[\hat{r},\hat{H}] \neq 0 \ ,[\hat{p},\hat{H}] \neq 0 \ \ i \ \ [\hat{L},\hat{H}] = 0$$

Ove jednačine govore da impuls i položaj nisu konstante kretanja ali da ugaoni impuls jeste. U ovom primeru Hamiltonijan ima rotacionu simetriju i ona podrazumeva da je orbitalni ugaoni moment konstanta kretanja.

UGAONI IMPULS

Plankova konstanta ima jedinice ugaonog impulsa. Ovo govori da h odnosno $\hbar = h/2\pi$, može biti osnovna jedinica ugaonog impulsa. Ovo takođe govori da bi ugaoni impuls mogao biti osnovna opservabla u kvantnoj fizici. Zaista postoje tačkolike kvantne čestice koje imaju unutrašnji ugaoni impuls koga zovemo spin. Spin tačkaste čestice ne može biti povezan sa orbitalnim kretanjem sastavnih delova, to je fundamentalna osobina koja ne može da se poredi ni sa čim u klasičnoj mehanici. U ovom delu mi ćemo da se bavimo fundamentalim osobinama ove veoma zahtevne teme.

Kvantna čestica može posedovati orbitalni ugaoni impuls i unutrašnji ugaoni impuls – spin . U odgovarajćim okonostima, orbitalni ugaoni impuls može odgovarati ugaonom impulsu u klasičnoj fizici, to je vektor koji s pravcem i intezitetom opisuje inerciju ugaonog kretanja. S druge strane – spin, nema nikakvu klasičnu manifestaciju, to je baš fundament kvantne mehanike, koji možda samo malo može podsećati na rotaciju klasičnog objekta. Najvažnija osobina ugaonog impulsa u kvantnoj mehanici je da su ishodi merenja u naboljem slučaju nejasni (fazi) vektori, tj vektori sa dva definisana svojstva : određenog inteziteta i samo jednu od tri kartezijanske komponente. Shodno tome, ugaoni impuls u kvantnoj mehanici se može odrediti sa dva kvantna broja. Obično, l i m_l se koriste da opišu orbitalni ugaoni impuls, s i m_s se koriste da opišu spin, a kvantni brojevi j i m_j, se koriste kada ugaoni impuls nastaje iz kombinacije spina i orbitalnog ugaonog impulsa i kada se opisuje opšti ugaoni impuls. Jedina moguća, precizna vrednost inteziteta ugaonog impulsa je data sa :

$$L = \sqrt{l(l+1)\hbar} \quad , za\ l = 1,2,3 \ldots \qquad (17.1)$$

Kada je intezitet (magnituda) fiksiran na kvantni broj l, orbitalni ugaoni impuls u svakom pravcu može imati $2l + 1$ mogućih vrednosti između $-l\hbar$ i $l\hbar$. Na primer, ako izaberemo da merimo orbitalni ugaoni impuls u pravcu z ose, postoji $2l + 1$ mogućih ishoda datih sa :

$$L_z = m_l\hbar \quad gde\ je\ m_l = \begin{cases} +l \\ +(l-1) \\ +(l-2) \\ . \\ . \\ . \\ -(l-2) \\ -(l-1) \\ -l \end{cases} \qquad (17.2)$$

, ali kada se to uradi, ugaoni impulsi u pravcu y i x ose postaju neodređeni, u smislu da, ako izaberemo da merimo x ili y komponentu mogući ishodi bi bili negde između $-l\hbar$ do $l\hbar$. Treba napomenuti da klasifikacija atomskog spektra dovodi do spektroskopske notacije u kojoj slova s, p, d, f, g se koriste da označe kvantna stanja sa $l = 0, l = 1, l = 2, l = 3\ i\ l = 4$. Shodno tome, stanje sa $l = 0$ se zove s-stanje, stanje sa $l = 1$ se zove p-stanje itd. Kvantni brojevi s i m_s se koriste kada se ugaoni impuls odnosi na spin. Za česticu se kaže da ima spin s kada je intezitet spina $S = \sqrt{s(s+1)\hbar}$ i ako je z komponenta :

$$S_z = m_s\hbar, \;\; gde\ je\ m_s = \begin{cases} +s \\ +(s-1) \\ +(s-2) \\ . \\ . \\ . \\ -(s-1) \\ -s \end{cases} \qquad (17.3)$$

Na primer, W bozon je čestica spina jedan sa $s = 1\ i\ m_s = +1,0,-1$, a elektron je čestica sa spinom ½ sa $s = \frac{1}{2} i\ m_s = \pm\frac{1}{2}$. Orbitalni i spin ugaoni impuls mogu da se kombinuju i da daju ukupni ugaoni impuls nekog inteziteta i z komponentom datom sa :

$$J = \sqrt{j(j+1)\hbar} \quad i\ J_z = m_j\hbar \quad (17.4)$$

, gde u načelu kvantni brojevi j i m_j mogu uzimati cele brojeve ali i polovine celih brojeva :

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2 \ldots \;\; i\ m_j = \begin{cases} +j \\ +(j-1) \\ . \\ . \\ . \\ -(j-1) \\ -j \end{cases} \qquad (17.5)$$

Stvarna vrednost kvantnog broja j zavisi od spina i orbitalnog ugaonog impulsa koji se kombinuju. Može se pokazati da, kada se kombinuju orbitalni ugaoni impuls sa kvantnim brojem l, sa spinom kvantnog broja s, može nastati nekoliko ukupnih ugaonih impulsa sa kvantnim brojevima :

$$j = l + s\,, l + s - 1, \ldots\ |l - s| \quad (17.6)$$

Treba primetiti da u principu, dva ugaona impulsa sa kvantnim brojevima j_1 i j_2 mogu se iskombinovati da daju ugaoni impuls sa kvantnim brojem j koji može uzeti vrednosti :

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \ldots, |j_1 - j_2| \quad (17.7)$$

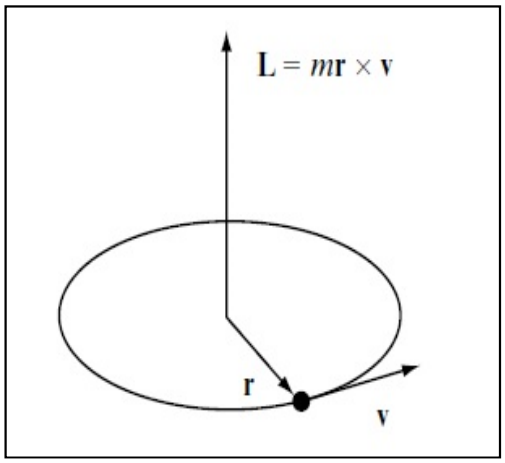
Ranije smo rekli da ugaoni impuls definišu dva kvantna broja kao fazi vektor. Nejasnoća vektora nastaje kada je jedna od Karetzijanskih komponenti jasno definisana, druge dve su neodređene, ali merene kvantno. Imajući u vidu da smo već nailazili na neodređenost položaja, impulsa i energije, onda ni neodređenost ugaonog impulsa ne bi trebala biti nikakvo iznenađenje. Zaista, neodređenost orbitalnog ugaonog impulsa se direktno može pratiti iz neodređenosti položaja i impulsa. Ali je iznenađenje da ugaoni impuls može biti samo celobrojni ili polucelobrojni umnožak od $\hbar$.

MAGNETNI IMPULS

Jednostavan magnetni impuls u klasičnoj fizici odgovara orbitirajućoj naelektrisanoj čestici. Ovaj magnetni impuls je direktno proporcionalan orbitalnom ugaonom impulsu i dat je sa :

$$\mu = \frac{q}{2m} L \quad (17.8)$$

, gde je q naelektrisanje a m masa čestice. Možemo proveriti validnost ove relacije posmatranjem čestice koja se kreće kružnom orbitom radijusa r, brzinom v, kao na slici 17.01.



Slika 17.01 Kružno kretanje čestice

Takva čestica dovodi do protoka električne struje, I, pa tim i do magnetnog impulsa IA, gde je A površina orbite. Pošto je struja jednaka naelektrisanju podeljenom sa periodom orbite imamo :

$$\mu = \frac{qv}{2\pi r}\pi r^2 = \frac{qrv}{2}$$

, koja može biti napisana, koristeći ugaoni impuls $L = mrv$, kao :

$$\mu = \frac{q}{2m} L$$

KVANTNI MAGNET

U kvantnoj fizici, magnetni impuls je takođe proporcionalan ugaonom impulsu, ali on je sada samo najbolji fazi vektor, sa preciznim intezitetom i jednom kartezijanskom komponentom. Ovu vezu ćemo ilustrovati posmatrajući magnetne osobine elektrona, protona,neutrona i atoma. Magnetne osobine elektrona proističu iz njegovog spina sa intezitetom i z komponentom datim jednačinama :

$$S = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar} \quad i \quad S_z = m_s\hbar$$

, i orbitalnog ugaonog impulsa sa intezitetom i z komponentom datim sa jednačinama :

$$L = \sqrt{l(l+1)\hbar} \quad i \quad L_z = m_l\hbar$$

Magnetni impuls je dat formulom sličnoj (17.8) uz neznatne modifikacije. Konkretno, z komponenta magnetnog impulsa usled spina elektrona je :

$$\mu_z^{spin} = -2\frac{e}{2m_e}S_z = -2\frac{e\hbar}{2m_e}m_s \quad (17.9)$$

, i ona usled orbitalnog ugaonog impulsa :

$$\mu_z^{orbit} = -\frac{e}{2m_e}L_z = -\frac{e\hbar}{2m_e}m_l \quad (17.10)$$

, gde su m_e masa i e - naelektrisanje elektrona.

Primetimo da je magnetni impuls koji potiče od spina elektrona duplo veći od onoga koji potiče od ugaonog impulsa; dodatni faktor 2 je objašnjen Dirakovom funkcijom, talasnom funkcijom za relativističku, tačkoliku kvantnu česticu sa polovinom spina. Magnetni impuls atoma potiče od kombinacije spina i orbitalnog ugaonog impulsa elektrona koji se nalaze u njemu, koji mogu biti opisani kvantnim brojevima j i m_j. U slabom magnetnom polju z komponenta magnrtnog impulsa atoma je :

$$\mu_z^{atom} = -g\frac{e}{2m_e}J_z = -g\frac{e\hbar}{2m_e}m_j \quad (17.11)$$

, gde je $J_z = m_j\hbar$ z komponenta ugaonog impulsa dok je g numerički faktor oznat pod nazivom Lande g-faktor. Zapravo, Lande g-faktor za atomsko stanje sa kvantnim brojevima j, l, s je :

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \quad (17.12)$$

Lande g-faktor ima vrednost dva ako je jedini izvor magnetizma u atomu spin elektrona, i vrednost jedan ako je to orbitalni ugaoni impuls. Pošto m_j može uzeti $2j+1$ vrednosti između $-j$ i $+j$, magnetni impuls atoma ima $2j+1$ komponenti. Jednačine (17.9),(17.10) i (17.11) ukazuju na to da prirodna jedinica za magnetni impuls povezan sa elektronom je :

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.274 \cdot 10^{-24} JT^{-1} \quad (17.13)$$

Ova fundamentalna konstanta se zove Borov magneton.

Protoni i neutroni za razliku od elektrona su kompozitne čestice koje se sastoje od kvarkova i gluona. Ovi konstituenti, prouzrokuju ugaoni impuls sa kvantnim brojevima $j = \frac{1}{2}$ i $m_j = \pm\frac{1}{2}$. Z komponente povezane sa magnetnim impulsom su :

$$\mu_z^{proton} = 2.79\frac{e\hbar}{2m_p}m_j \quad i \quad \mu_z^{neutron} = -1.95\frac{e\hbar}{2m_p}m_j \quad (17.14)$$

, gde je m_p masa protona. Primetimo da je prirodna jedinica za ove magnetne impulse, kao i za magnetne impulse jezgra koje sadrži protone i neutrone :

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5.05 \cdot 10^{-27} JT^{-1} \quad (17.15)$$

Ova jedinica se zove nuklearni magneton.

Magnetna energija

Kada se klasični magnetni impuls μ nalazi u magnetnom polju B, on ima energiju orjentacije datu sa :

$$E_{mag} = -\mu B \quad (17.16)$$

Ako izaberemo da je magnetno polje usmereno u pravcu z ose imamo da je :

$$E_{mag} = -\mu_z B \quad (17.17)$$

, gde je μ_z komponenta magnetnog impulsa u smeru z ose, koja može da uzme bilo koju vrednost između $+\mu$ i $-\mu$. Znači za klasičan magnet postoji kontinuum energija orjentacije između $-\mu B$ i $+\mu B$. Nasuprot tome, energija orjentacije kvantnog magneta u magnetnom polju je kvantizovana. Za polje B u pravcu z ose, ova energija je data sa $-\mu_z B$, gde je μ_z sada kvantizovana z komponenta magnetnog impulsa. Na primer, možemo iskoristiti jednačinu (17.11) da pokažemo da je magnetna energija atoma u atomskom stanju sa ugaonim kvantnim brojevima j i m_j :

$$E_{mag} = m_j g \mu_B B$$

, gde je μ_B Borov magneton, a g Lande g-faktor. Dakle za datu vrednost j, postoji $2j + 1$ magnetnih energetskih nivoa datih sa :

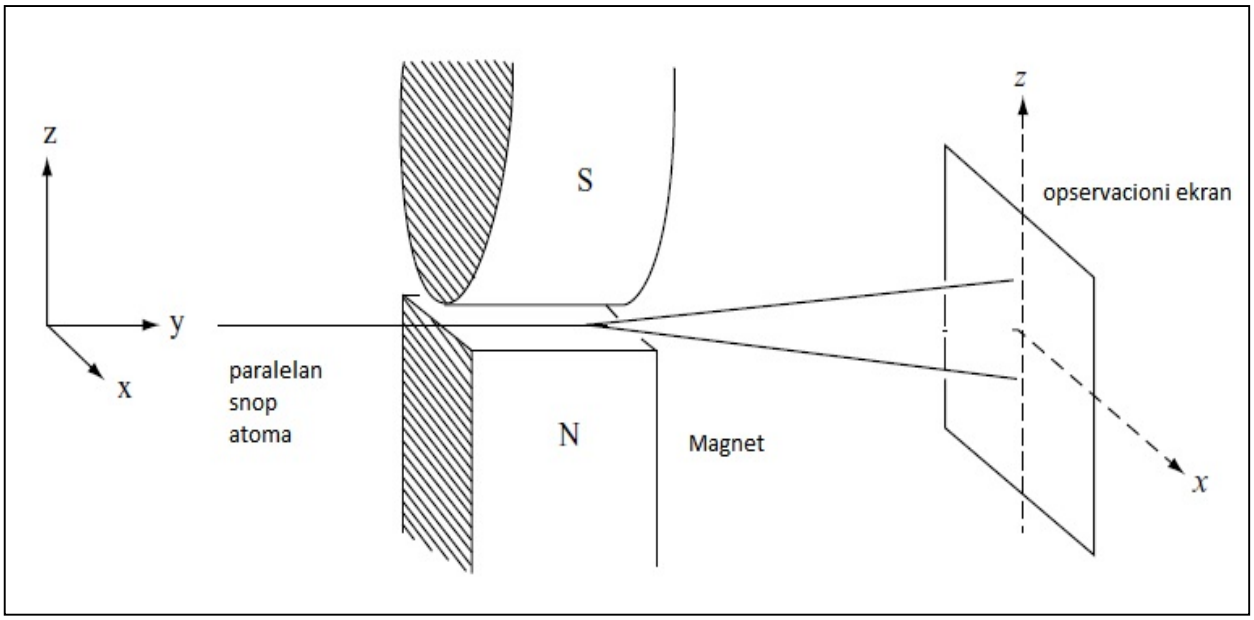
$$E_{mag} = \begin{cases} +jg\mu_B B \\ +(j-1)g\mu_B B \\ . \\ . \\ . \\ -(j-1)g\mu_B B \\ -jg\mu_B B \end{cases} \quad (17.18)$$

Kada je $j = 1/2$ postoje dva energetska nivoa, kada je $j = 1$ postoje tri energetska nivoa, kada je $j = 3/2$ postoje četiri nivoa itd. Indirektni dokazi za atomske magnetne energetske nivoe su obezbeđeni posmatranjem efekata koje magnetno polje uzrokuje na spektralnim linijama. Magnetno polje deli atomske energetske nivoe sa datih j na $2j + 1$ magnetnih energetskih nivoa sa različitim vrednostima za m_j, i radijativni prelazi između stanja sa različitim vrednostima j sada dovode do nekoliko pažljivo raspoređenih spektralnih linija umesto jedne. Ovaj efekat se zove Zemanov efekat. Međutim, direktan dokaz kvantizacije magnetne energije je obezbeđen Stern-Gerlahovim eksperimentom. U ovom eksperimentu pojedinačni atomi prolaze kroz neuniformno magnetno polje koje ih razdvaja prema vrednosti njihovog magnetnog impulsa u datom pravcu. Osnovna šema ovog eksperimenta je predstavljena na slici 17.02. Snop atoma prolazi kroz magnetno polje koje se generiše iz specijalno oblikovanih polova elektromagneta. Smer magnetnog polja je uglavnom u jednom smeru, recimo u smeru z ose, ali njegova snaga $B(x, y, z)$ upadljivo raste kako se z povećava. U ovom polju svaki atom stiče energiju :

$$E_{mag}(x, y, z) = -\mu_z B(x, y, z)$$

, koja zavisi od z komponente njegovog magnetnog impulsa μ_z i lokacije u polju. Pošto magnetno polje jako varira u zavisnosti od z, atom skreće pod uticajem sile u z pravcu. Ta sila je data preko jednačine :

$$F = -\frac{\partial F_{mag}}{\partial z} = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z}$$



Slika 17.02 . Šema Stern- Gerlahovog eksperimenta

Ako z komponenta moganrtnog impulsa može uzeti bilo koju vrednost između +μ i –μ , atomski snop bi se trebao razmazati na ekranu. Ali za realan atom u stanju sa kvantnim brojem j, z komponenta magnetnog impulsa može uzeti jednu od $2j+1$ diskretnih vrednosti pa će snop takvih atoma biti podeljan na $2j+1$ snopova na opservacionom ekranu. U svom originalnom eksperimentu Stern i Gerlah su otkrili da da snop atoma srebra u svom osnovnom stanju, je podeljen na dva snopa na ekranu. Ovo znači da merena Kartezijanska komponenta magnetnog impulsa atoma srebra u osnovnom stanju može uzeti samo dve moguće vrednosti i da kvantni brojevi ugaonog impulsa atoma su $j = 1/2$ i $m_j = \pm 1/2$. Oni su takođe pokazali merenjem udaljenosti dva snopa atoma koji su proizašla iz magneta, da je intezitet magnetnog impulsa atoma srebra reda Borovog magnetona.

ORBITALNI UGAONI IMPULS

U ovom delu ćemo se pozabaviti definisanjem ugaonog impulsa u klasičnoj fizici uvodeći operator koji opisuje orbitalni ugaoni impuls u kvantnoj fizici.

Posmatrajmo česticu u trenutku t sa vektorom pozicije i impulsom :

$$r = (x, y, z) \;\; i \;\; p = (p_x, p_y, p_z)$$

Orbitalni ugaoni impuls oko koordinatnog početka je dat vektorskim proizvodom :

$$L = r \times p$$

, koji je vektor sa tri Kartezijanske komponente :

$$L_x = yp_z - zp_y \,, L_y = zp_x - xp_z \,, L_z = xp_y - yp_x$$

, i inteziteta :

$$|L| = \sqrt{L_x^2 + L_y^2 + L_z^2}$$

Orbitalni ugaoni impuls u kvantoj fizici je opisan operatorom :

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = -i\hbar r \times \nabla \quad (17.19)$$

Ovo je vektorski operator sa tri Kartezijanske komponente :

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

, koji deluje na talasnim funkcijama koje predstavljaju moguća kvantna stanja čestice. Kada je poznata talasna funkcija $\Psi(r,t)$ očekivana vrednsot ugaonog impulsa se može izračunati. Na primer, integrali :

$$\langle L_x \rangle = \int \Psi^* \hat{L}_x \Psi d^3r \quad i \quad \langle L_x^2 \rangle = \int \Psi^* \hat{L}_x^2 \Psi d^3r$$

, daju očekivane vrednosti x komponente i njenog kvadrata za orbitalni ugaoni impuls. Kada je talasna funkcija svojstvena funkcija $\hat{L}_x$ sa svojstvenom vrednošću L_x, tj kada je :

$$\hat{L}_x \Psi(r,t) = L_x \Psi(r,t)$$

, može se pokazati da je $\langle L_x \rangle = L_x$ i $\langle L_x^2 \rangle = L_x^2$. Ovo implicira da je neodređenost :

$$\Delta L_x = \sqrt{\langle L_x^2 \rangle - \langle L_x \rangle^2}$$

, jednaka nuli i da svojstvena funkcija reprezentuje kvantno stanje sa preciznim vrednostima za x komponentu orbitalnog ugaonog impulsa datog preko svojstvene vrednosti L_x.

UGAONI OBLIK TALASNE FUNKCIJE

Talasna funkcija čestice može imati neograničen broj ugaonih oblika. Ali svaka talasna funkcija može biti izražena u obliku osnovne talasne funkcije sa jednostavnim ugaonim oblikom. Ova bazna talasna funkcija se često uzima da bude talasna funkcija sa specifičnim osobinama orbitalnog ugaonog impulsa. Prema tome, mi ćemo posmatrati neke talasne funkcije sa jednostavnom ugaonom zavisnošću i izvoditi zaključke o osobinama orbitalnog ugaonog impulsa čestice koju one opisuju. Osobine koje ćemo istraživati su : Sferna simetrija talasne funkcije date sa :

$$\psi_{(0,0)} = R(r) \quad (17.20)$$

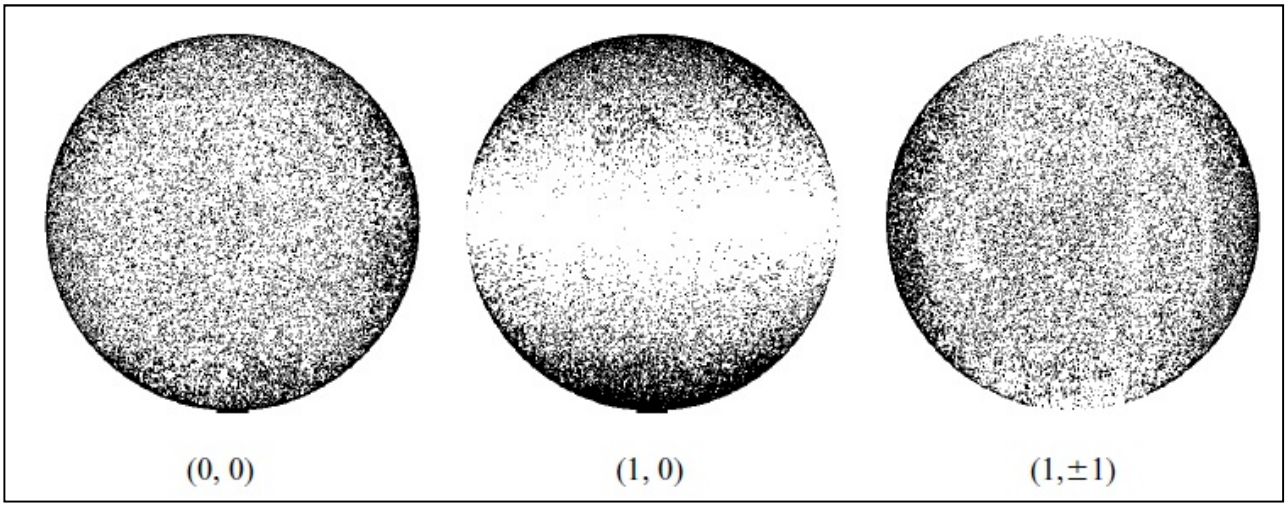
, gde je $R(r)$ svaka funkcija koja se lepo ponaša, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, i talasne funkcije :

$$\psi_{(1,0)} = R(r)\frac{z}{r} \quad , \quad \psi_{(1,+1)} = R(r)\frac{x+iy}{r} \quad , \quad \psi_{(1,-1)} = R(r)\frac{x-iy}{r} \quad (17.21)$$

Obrazloženje za oznake $(0,0)$, $(1,0)$ i $(1,\pm 1)$, će postati jasno pošto odredimo osobine ugaonog impulsa za stanja opisana ovom talasnom funkcijom. Raspodela verovatnoće pozicije za ove talasne funkcije :

$$\left|\psi_{(0,0)}\right|^2 = |R(r)|^2, \qquad \left|\psi_{(1,0)}\right|^2 = |R(r)|^2 \frac{z^2}{r^2}, \quad \left|\psi_{(1,\pm 1)}\right|^2 = |R(r)|^2 \frac{x^2+y^2}{r^2}$$

, su prikazane na slici 17.03.



Slika 17.03. Raspodele verovatnoće pozicije talasne funkcije $\psi_{(0,0)}$, $\psi_{(1,0)}$ i $\psi_{(1,\pm 1)}$

Primetimo da čestica opisana funkcijom $\psi_{(0,0)}$, ima jednake verovatnoće položaja u kom je možemo naći na celoj sferi radijusa r, dok su u druga dva slučaja neki od regiona favorizovani u odnosu na druge. Da bi pronašli osobine orbitalnog ugaonog impulsa čestice opisane sa talasnim funkcijama (17.20) i (17.21) , posmatrajmo uticaj operatora ugaonog impulsa datog sa (17.19) na ove talasne funkcije. Prvo razmotrimo uticaj vektor operatora $\hat{L}$ na funkciju R(r). Koristeći :

$$\hat{L} = -i\hbar r \times \nabla \quad i \quad \nabla R(r) = e_r \frac{dR}{dr}$$

, gde je e_r jedinični vektor u pravcu r, dobijamo :

$$\hat{L}R(r) = -i\hbar r \times \nabla R(r) = -i\hbar r \times e_r \frac{dR}{dr}$$

Pošto je $r \times e_r = 0$, zaključujemo da je $\hat{L}R(r) = 0$. Dakle sferna simetrija talasne funkcije $\psi_{(0,0)} = R(r)$ zadovoljava tri jednačine :

$$\hat{L}_x \psi_{(0,0)} = L_x \psi_{(0,0)}, \qquad sa \;\; L_x = 0$$

$$\hat{L}_y \psi_{(0,0)} = L_y \psi_{(0,0)}, \qquad sa \;\; L_y = 0$$

$$\hat{L}_z \psi_{(0,0)} = L_z \psi_{(0,0)}, \qquad sa \;\; L_z = 0$$

Ona takođe zadovoljava i jednačinu :

$$\hat{L}^2\psi_{(0,0)} = L^2\psi_{(0,0)}\,, \qquad za\ L^2 = 0$$

, gde je :

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Ove jednačine pokazuju da svaka sferno-simetrična talasna funkcija je istovremeno svojstvena funkcija operatora koji opisuje intezitet i svake od tri Kartezijanske komponente operatora orbitalnog ugaonog impulsa i da je svojstvena vrednost u svakom slučaju jednaka nuli. Na kraju zaključujemo da sve sfernosimetrične funkcije opisuju česticu sa nultim orbitalnim ugaonim impulsom. Sada ćemo da razmotrimo funkciju :

$$\psi_{(1,0)} = R(r)\frac{z}{r}$$

, koja opisuje kvantnu česticu koju ćemo najverovatnije naći bliže severnom ili južnom polu sfere nego u ekvatoru, kao na drugoj figuri slike 17.03. Da bi našli osobine ugaonog impulsa ove čestice procenićemo uticaj operatora ugaonog impulsa na ovu talasnu funkciju. Dakle :

$$\hat{L}\left(\frac{R(r)}{r}z\right) = z\hat{L}\left(\frac{R(r)}{r}\right) + \frac{R(r)}{r}\hat{L}z = \frac{R(r)}{r}\hat{L}z$$

, što implicira :

$$\hat{L}_x\psi_{(1,0)} = \frac{R(r)}{r}\hat{L}_x z = -i\hbar\frac{R(r)}{r}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)z = -i\hbar\frac{R(r)}{r}y$$

$$\hat{L}_y\psi_{(1,0)} = \frac{R(r)}{r}\hat{L}_y z = -i\hbar\frac{R(r)}{r}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)z = +i\hbar\frac{R(r)}{r}x$$

$$\hat{L}_z\psi_{(1,0)} = \frac{R(r)}{r}\hat{L}_z z = -i\hbar\frac{R(r)}{r}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)z = 0$$

Prve dve jedna;ine govore da da talasna funkcija $\psi_{(1,0)}$ nije svojstvena funkcija $\hat{L}_x$ ili $\hat{L}_y$, ali treća jednačina kaže da $\psi_{(1,0)}$ jeste svojstvena funkcija od $\hat{L}_z$ sa nultom svojstvenom vrednošću pošto je :

$$\hat{L}_z\psi_{(1,0)} = L_z\psi_{(1,0)} \quad za\ L_z = 0 \qquad (17.22)$$

Razmatrajući članove oblika :

$$\hat{L}_x z = -i\hbar y\,, \hat{L}_x y = +i\hbar z\,, \hat{L}_x^2 z = \hbar^2 z$$

Lako je pokazati da je :

$$\hat{L}_x^2\psi_{(1,0)} = \hbar^2\psi_{(1,0)}$$

Slično lako možemo pokazati da vredi :

$$\hat{L}_y^2\psi_{(1,0)} = \hbar^2\psi_{(1,0)} \quad i \quad \hat{L}_z^2\psi_{(1,0)} = 0$$

Kombinujući ove rezultate dolazimo do :

$$\left(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2\right)\psi_{(1,0)} = 2\hbar^2\psi_{(1,0)} \qquad (17.23)$$

Jednačine (17.22) i (17.23) pokazuju, da je talasna funkcija $\psi_{(1,0)}$, istovremeno svojstvena funkcija operatora $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$, i $\hat{L}_z$, sa svojstvenim vrednostima $L^2 = 2\hbar^2$ i $L_z = 0$. Dakle, ona opisuje česticu inteziteta impulsa $L = \sqrt{2}\hbar$ i z komponente jednake nuli, ali njen orbitalni ugaoni impuls su x i y pravcu su neodređeni. Jasno, možemo da napravimo i druge funkcije koje imaju slične osobine. Na primer, ako zamenimo z u izrazu za $\psi_{(1,0)}$ sa x ili y dobijamo talasne funkcije :

$$\psi'_{(1,0)} = R(r)\frac{x}{r} \;\; i \;\; \psi''_{(1,0)} = R(r)\frac{y}{r} \qquad (17.24)$$

Obe ove jednačine opisuju česticu sa orbitalnim ugaonim impulsom inteziteta $L = \sqrt{2}\hbar$, ali za $\psi'_{(1,0)}$, x komponenta je nula, a y i z komponente su neodređene, dok za $\psi''_{(1,0)}$, y komponenta je nula a x i z su neodređene. Konačno, razmotrimo funkciju :

$$\psi_{(1,+1)} = R(r)\frac{x+iy}{r} \quad i \quad \psi_{(1,-1)} = R(r)\frac{x-iy}{r}$$

, koje obadve opisuju česticu čija je verovatnoća pronalaska veća na ekvatoru sfere sa slike 17.03 nego na polovima. Procenom delovanja operatora ugaonog impulsa na funkcije $x \pm iy$, lako je pokazati da ove talasne funkcije nisu svojstvene funkcije od $\hat{L}_x$ ili $\hat{L}_y$, ali da jesu istovremeno svojstvene funkcije od $\hat{L}_z$ i $\hat{L}^2$. Stvarno :

$$\hat{L}_z\psi_{(1,+1)} = +\hbar\psi_{(1,+1)} \;\; i \;\; L^2\psi_{(1,+1)} = +2\hbar^2\psi_{(1,+1)}$$

$$\hat{L}_z\psi_{(1,-1)} = -\hbar\psi_{(1,-1)} \;\; i \;\; L^2\psi_{(1,+1)} = +2\hbar^2\psi_{(1,-1)}$$

Istražujući osobine ovih jednostavnih talasnih funkcija možemo ilustrovati tri osnovne osobine orbitalnog ugaonog impulsa u kvantnoj mehanici :

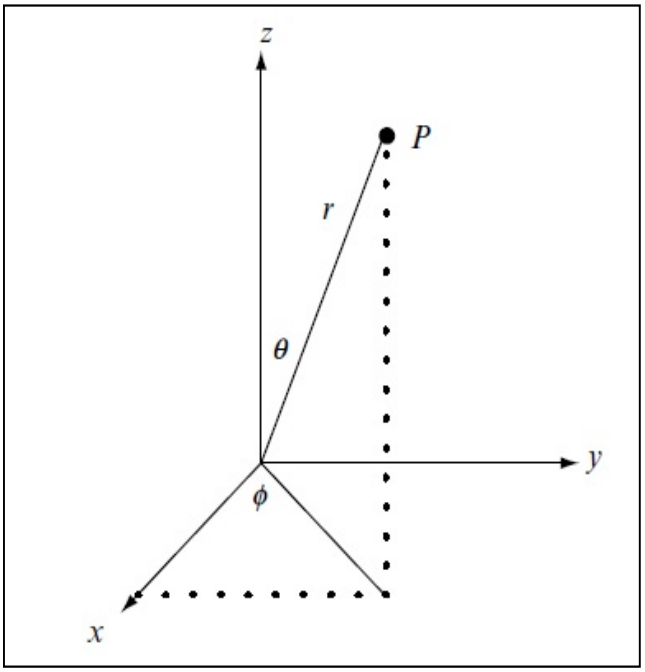
- Orbitalni ugaoni impuls u kvanntoj mehanici je kvantizovan i prirodna jedinica za ugaoni impuls je :

$$\hbar = 1.055 \cdot 10^{34}\, Js$$

- Orbitalni ugaoni impuls u kvantnoj fizici je u najboljem slučaju fazi vektor. Možemo samo da precizno odredimo intezitet i jednu od prostornih komponenti. To je zbog toga što komponente ugaonog impulsa nisu kompatibilne opservable.
- Kvantna čestica sa specifičnim osobinama orbitalnog ugaonog impulsa ima specifičnu talasnu funkciju sa specifičnim ugaonim oblikom. Ako je orbitalni ugaoni impuls nula, talasna funkcija je sferno simetrična a ako orbitalni ugaoni impuls nije nula, talasna funkcija ima ugaonu zavisnost.

SFERNI HARMONICI

Do sada smo posmatrali talasne funkcije u funkciji Kartezijanskih koordinata x, y, z. U praksi se češće posmatraju talasne funkcije u funkciji sfernih polarnih koordinata, r,θ,ϕ kao na slici 17.04.



Slika 17.04 – Kartezijanski i sferni koordinatni sistem

Na slici imamo Kartezijanski koordinatni sistem i sferne koordinate za koje važe relacije :

$$x = r\sin\theta\cos\phi$$

$$y = r\sin\theta\sin\phi$$

$$z = r\cos\theta$$

Kada je kvantno stanje reprezentovano funkcijom $\Psi(r,\theta,\phi)$, zavisnost od θ i ϕ specificira ugaoni oblik koji određuje svojstva orbitalnog ugaonog impulsa. U stvari, sva svojstva orbitalnog ugaonog impulsa se mogu opisati koristeći istovremno svojstvenu funkciju za $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$. Ova svojstvena funkcija ima naziv - sferni harmonici. Označava se sa $Y_{l,m_l}(\theta,\phi)$ i mora da zadovoljava jednačinu svojstvenih vrednosti :

$$\hat{L}^2 Y_{l,m_l} = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m_l} \quad i \quad \hat{L}_z Y_{l,m_l} = m_l \hbar Y_{l,m_l} \qquad (17.25)$$

, gde kvantni brojevi l i m_l mogu uzimati vrednosti $l = 0,1,2,\ldots$ a $m_l = -l,\ldots,l$. Ove svojstvene funkcije su ortogonalne pošto zadovoljavaju uslov :

$$\int Y^*_{l',m_l'} Y_{l,m_l} d\Omega = 0 \quad ako\ je\ l' \neq l\ \ i\ \ m_l' \neq m_l \qquad (17.26)$$

, i često se normalizuju tako da je :

$$\int \left|Y_{l,m_l}\right|^2 d\Omega = 1 \qquad (17.27)$$

U ovim integralima dΩ je prostorni ugao :

$$d\Omega = \sin\theta\, d\theta d\phi$$

, a limiti integracije su od θ=0 do θ=π i ϕ=0 do ϕ=2π.

Eksplicitna forma harmonika za $l = 0, l = 1, l = 2$ je data u tabeli 17.01.

Sferni harmonici u funkciji θ i ϕ	Sferni harmonici u funkciji x, y, z
$\Upsilon_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	$\Upsilon_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$\Upsilon_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$	$\Upsilon_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{z}{r}$
$\Upsilon_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$	$\Upsilon_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\frac{x \pm iy}{r}$
$\Upsilon_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$	$\Upsilon_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{3z^2 - r^2}{r^2}$
$\Upsilon_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi}$	$\Upsilon_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\,\frac{(x \pm iy)z}{r^2}$
$\Upsilon_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}$	$\Upsilon_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\frac{x^2 - y^2 \pm 2ixy}{r^2}$

Tabela 17.01

Ako uporedimo ove vrednosti iz tabele sa jednačinama (17.20) i (17.21) možemo primetiti da vredi :

$$\psi_{(0,0)} \propto \Upsilon_{0,0}(\theta,\phi)$$

, kao i da je :

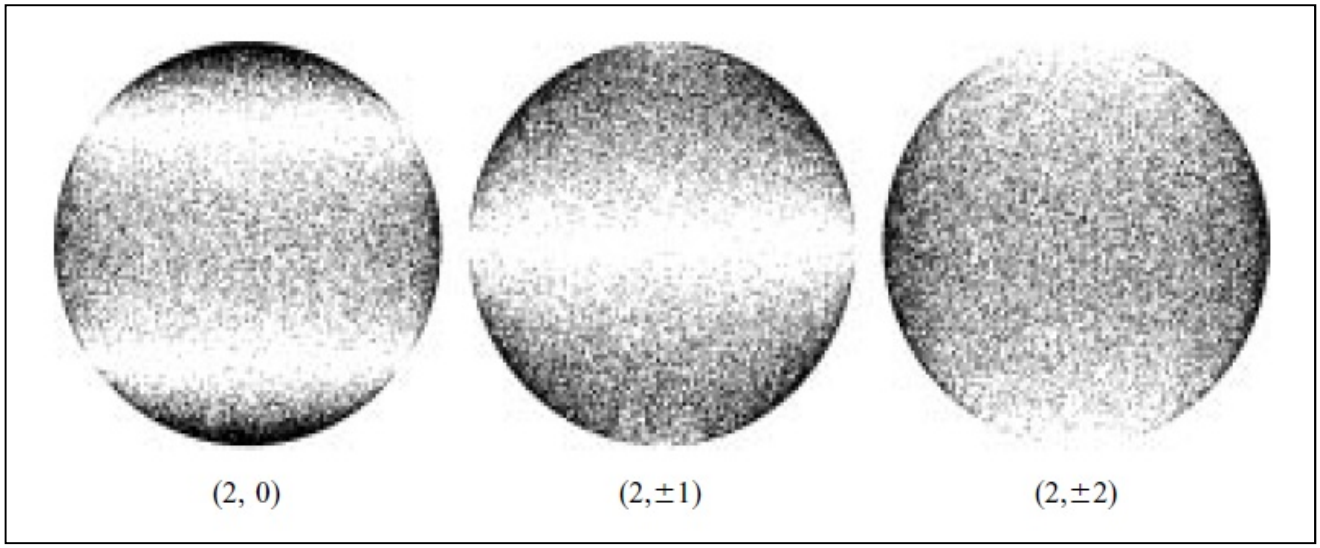
$$\psi_{(1,0)} \propto \Upsilon_{1,0}(\theta,\phi)\ i\ \psi_{(1,\pm1)} \propto \Upsilon_{1,\pm1}(\theta,\phi)$$

Takođe možemo primetiti da sferni harmonici imaju jednostavnu zavisnost od azimutnog ugla ϕ datu sa

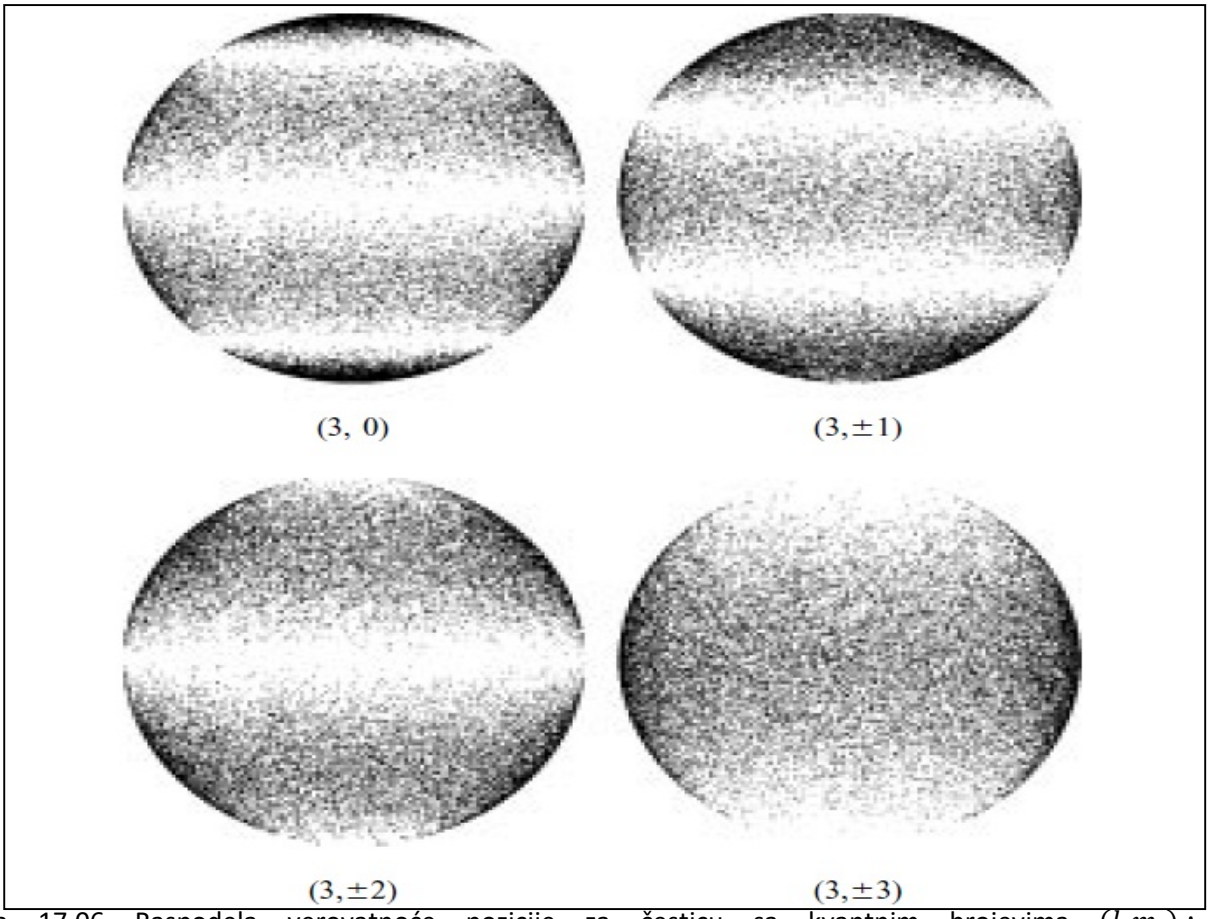
$$\Upsilon_{l,m_l}(\theta,\phi) = F_{l,m_l}(\theta)e^{im_l\phi} \quad (17.28)$$

, ali tada θ zavisnost postaje sve komplikovanija kako l raste. Ugaoni oblik raspodele verovatnoće pozicije za česticu sa kvantnim brojem ugaonog impulsa l i m_l je dat sa $\left|\Upsilon_{l,m_l}(\theta,\phi)\right|^2$. Ugaoni oblici za $l = 0$ i $l = 1$, su prikazani na slici 17.03, a kompleksniji oblici za $l = 2$ i $l = 3$ na slikama 17.05 i 17.06. Primetimo da ne postoji zavisnost od azimutnog ugla ϕ, ali da zavisnost od θ postaje kompleksnija kako se l povećava.

LINEARNA SUPERPOZICIJA



Sllika 17.05 Raspodela verovatnoće pozicije za česticu sa kvantnim brojevima (l, m_l) : $(2,0), (2, \pm 1), (2, \pm 2)$



Slika 17.06 Raspodela verovatnoće pozicije za česticu sa kvantnim brojevima (l, m_l) : $(3,0), (3, \pm 1), (3, \pm 2), (3, \pm 3)$

Već ranije smo naglasili da svaka svojstvena funkcija orbitalnog ugaonog impulsa ima specifičan ugaoni oblik. Mi ćemo sada pokušati da opišemo ove ugaone forme, kompletnim setom ugaonih oblika. Kao ilustraciju ove ideje, u najjednostavnijem mogućem kontekstu, fokusiraćemo se isključivo, za impuls, na ϕ zavisnost talasne funkcije, i potisnuti svaku referencu prema r i θ koordinati.

Svaka kompleksna talasna funkcija $\psi(\phi)$ u intervalu $0 \leq \phi \leq 2\pi$ se može predstaviti Furieovim redom :

$$\psi(\phi) = \sum_n c_n e^{in\phi}$$

, gde je n ceo broj između $-\infty$ i $+\infty$, a c_n je dat sa :

$$c_n = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{-in\phi}\,\psi(\phi)d\phi$$

Da bi notacija bila u skladu sa notacijom kvantne fizike ovu jednačinu možemo napisati na sledeći način :

$$\psi(\phi) = \sum_{m_l} c_{m_l} Z_{m_l}(\phi) \quad gde\ je\ Z_{m_l}(\phi) = \frac{e^{im_l\phi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (17.29)$$

Može se pokazati da je bazna funkcija $Z_{m_l}(\phi)$ svojstvena funkcija za $\hat{L}_z$ sa svojstvenim vrednostima $m_l\hbar$. Dakle jednačina (17.29) je još jedan primer principa linearne superpozicije u kvantnoj mehanici, u kome se navodi da je bilo koje kvantno stanje linearna superpozicija drugih kvantnih stanja; u ovom slučaju linearna superpozicija kvantnih stanja sa određenim vrednostima za L_z. Koeficijenti c_{m_l} su verovatnoće amplitude za L_z , zato što je $\left|c_{m_l}\right|^2$ verovatnoća da izmerena vrednost z komponente orbitalnog impulsa bude jednaka $m_l\hbar$. Na sličan način θ i ϕ zavisnost bilo koje talasne funkcije može biti izražena preko opšteg Furieovog reda koji uključuje osnovne funkcije koje su svojstvene funkcije za $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$. Ove svojstvene funkcije formiraju kompletan set trodimenzionalnih ugaonih oblika tako da talasna funkcija $\psi(r,\theta,\phi)$ može biti izražena preko :

$$\psi(r,\theta,\phi) = \sum_{l=0}^{l=\infty}\sum_{m_l=-l}^{m_l=l} c_{l,m_l}(r)\Upsilon_{l,m_l}(\theta,\phi) \qquad (17.30)$$

Koristeći ortogonalnost i normalizacione uslove za sferne harmonike, jednačine (17.26) i (17.27) , možemo pokazati da koeficijenti $c_{l,m_l}(r)$ koji se pojavljuju u ovom redu, se mogu napisati u obliku :

$$c_{l,m_l}(r) = \int \Upsilon^*_{l,m_l}(\theta,\phi)\psi(r,\theta,\phi)\,d\Omega \quad (17.31)$$

Ovi koeficijenti su verovatnoće amplitude za orbitalni ugaoni impuls, u stvari, verovatnoća da će se čestica pronaći između r i $r+dr$, sa orbitalnim ugaonim impulsom $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ i $L_z = m_l\hbar$, koji je dat sa

$\left|c_{l,m_l}\right|^2 r^2 dr$. Kao primer uzmimo talasnu funkciju $\psi'_{(1,0)}$ datu jednačinom (17.24). Koristeći tabelu 17.01 dobijamo :

$$\psi'_{(1,0)} = -\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\frac{R(r)}{r}\left[\Upsilon_{1,\pm1}(\theta,\phi) + \Upsilon_{1,-1}(\theta,\phi)\right]$$

Pošto je ova jednačina linearna superpozicija sfernih harmonika sa $l = 1, m_l = +1$ i $l = 1, m_l = -1$, merenja inteziteta i z komponente orbitalnog ugaonog impulsa mogu imati dva moguća ishoda : $L = \sqrt{2}\hbar$, $L_z = +\hbar$ ili $L = \sqrt{2}\hbar$, $L_z = -\hbar$. Pošto su magnitude koeficijenata superpozicije isti, obadva ishoda imaju istu verovatnoću. Linearna superpozicija data jednačinom (17.30) obezbeđuje korisnu predstavu talasne funkcije rasejane čestice. U ovom slučaju funkcija c_{l,m_l} se zove parcijalni talas. On može biti dekomponovan da dolazni i odlazni sferični talas, a efekti rasejanja izazivaju fazni pomak odlazećeg talasa. Analogan fazni pomak smo ranije razmatrali kod jednodimenzionalnog procesa rasejanja, ali u trodimenzionalnom procesu rasejanja postoji fazni pomak za svaki orbitalni ugaoni impuls.

ATOM VODONIKA

Kao što solarni sistem obezbeđuje prvi značajan test zakona klasične mehanike, tako i atom vodonika obezbeđuje test za zakone kvantne mehanike. Atom vodonika je najjednostavniji atom, sastoji se od jednog elektrona i jednog protona. U prvoj aproksimaciji, jezgro atoma koje ima mnogo veću masu od elektrona se može smatrati statičnim. Ovo znači da će razumevanje osobina vodonikovog atoma biti moguće rešavanjem jedno-čestičnog kvantno mehaničkog problema, problema elektrona u Kulonovom energetskom polju potencijala :

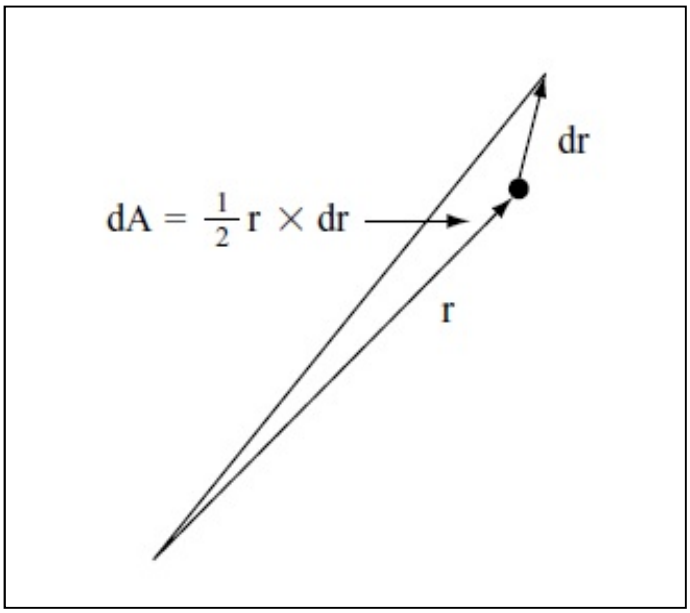
$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (18.1)$$

CENTRALNI POTENCIJAL

Počećemo sa razmatranjem opšteg problema čestice u centralnom potencijalnom polju koje slično kao i Kulonovo polje zavisi samo od udaljenosti čestice od fiksnog ishodišta. Razmotrimo klasičnu česticu mase m , sa vektorom položaja r, impulsa p i orbitalnog ugaonog impulsa $L = r \times p$ u odnosu na fiksiranu centralnu tačku. Ako se čestica kreće u polju centralnog potencijala, na nju deluje sila data sa :

$$F = -\frac{dV}{dr}e_r$$

, gde je e_r jedinični vektor u pravcu r. Pošto ova sila deluje duž radijus-vektora r, obrtni moment čestice, $N = r \times F$ je nula i čestica se kreće sa konstantnim ugaonim impulsom L. Geometrijske implikacije konstantnog ugaonog impulsa mogu se razumeti posmatranjem slike 18.01. koja pokazuje vektorski



Slika 18.01

prostor koji zahvata vektor r u vremenu dt.

$$dA = \frac{L}{2m} dt$$

Ovo znači da, kada je ugaoni impuls konstantan vektor, čestica se kreće u fiksnoj ravni sa radijus vektorom koji prolazi kroz oblast konstantnom brzinom $L/2m$. Impuls čestice koja se kreće u ravni ima dve nezavisne komponente koje konvencionalno možemo označiti kao radijalnu i transverzalnu komponentu.

$$p_r = m\frac{dr}{dt}, \quad p_t = \frac{L}{m}$$

Ako kinetičku energiju $p^2/2m$ napišemo preko p_r i p_t dobijamo izraz za konstantnu ukupnu energiju čestice :

$$E = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \quad (18.2)$$

Primetimo da energiju čestice možemo posmatrati kao sumu dva člana, radijalne kinetičke energije $\frac{p_r^2}{2m}$ i efektivne potencijalne energije u formi :

$$V_e(r) = \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \quad (18.3)$$

Efektivna sila koja odgovara efektivnom potencijalu deluje u radijalnom smeru i ima intezitet :

$$F_e = -\frac{dV_e}{dr} = \frac{L^2}{mr^3} - \frac{dV}{dr}$$

Član $\frac{L^2}{mr^3}$ koji odgovara $\frac{mv^2}{r}$ za česticu koja se kreće brzinom v kružnicom radijusa r sa ugaonim impulsom $L = mrv$ reprezentuje centrifugalnu silu. Dakle član $\frac{L^2}{2mr^2}$ u jednačini efektivnog potencijala (18.3) može se posmatrati kao centrifugalna potencijalna energija ili kao poprečna kinetička energija. Najvažniji primer klasičnog kretanja u centralnom potencijalnom polju je planetarno kretanje. Planeta mase m kreće se oko Sunca sa gravitacionom potencijalnom energijom :

$$V(r) = -\frac{GmM_{\odot}}{r}$$

Planete se oko Sunca kreću po eliptičnim orbitama, a da mogu da odbacuju višak energije njihovo kretanje bi postalo savršeno kružno. Ako bi mogle da uzimaju energiju od Sunca, putanje bi im postale parabole a pri većoj akviziciji energije putanje bi postale hiperbole. Planetarno kretanje je predstavljalo prvi vanzemaljski test zakona klasične fizike. Klasični zakoni su uspešno položili ovaj test. Orbitalni ugaoni impuls planete Zemlje je čudesnih $3 \cdot 10^{74}\hbar$. Atom vodonika obezbeđuje drugi primer kretanja u polju centralnog potencijala jer se elektron naelektrisanja – e kreće oko jezgra naelektrisanja $+e$. Kada elektron ima ugaoni impuls mnogo veći od $\hbar$, klasična mehanika može biti korišćena da opiše putanju elektrona koja je konusni presek. Ali kada je ugaoni impuls komparabilan sa $\hbar$, mora se koristiti kvantna mehanika i elektron je opisan kvantnim stanjima neodređenih osobina.

Kvantna stanja čestice sa centralnim potencijalom su opisana talasnom funkcijom $\Psi(r, \theta, \phi, t)$. Mi ćemo se ovde fokusirati na kvantna stanja sa jasno definisanom energijom E koja prema ranijim razmatranjima ima talasnu funkciju u formi :

$$\Psi(r, \theta, \phi, t) = \psi(r, \theta, \phi)e^{-iEt/\hbar} \quad (18.4)$$

, gde je $\psi(r, \theta, \phi)$ svojstvena funkcija energije koja zadovoljava jednačinu svojstvenih vrednosti :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi = E\psi \quad (18.5)$$

Ova parcijalna diferencijalna jednačina sa tri nezavisne varijable r, θ i ϕ, može biti jako jednostavna ako pretpostavimo da kvantno stanje ima pored definisane energije i definisane osobine ugaonog impulsa čije smo tipove obrađivali u prethodnom poglavlju. Konkretno, ako pretpostavimo da je intezitet orbitalnog ugaonog impulsa $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ i njegova z komponenta $L_z = m_l\hbar$, gde su l i m_l kvantni brojevi koji mogu uzeti vrednosti $l = 0,1,2 \ldots$ i $m_l = -l, \ldots, l$, svojstvena funkcija ima oblik :

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Upsilon_{l,m_l}(\theta, \phi) \quad (18.6)$$

U ovoj jednačini $\Upsilon_{l,m_l}(\theta, \phi)$ je istovremeno svojstvena funkcija od $\hat{L}^2$ i L_z zadovoljavaju jenačinu (17.25) i $R(r)$ je nepoznata funkcija r. Ako jednačinu (18.6) uvstimo u (18.5) dobijamo :

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{r}\frac{\partial^2(r\psi)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial\phi}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\phi^2}\right]$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$$

, i takođe koristeći jednačinu (17.25) dobijamo sledeću običnu diferencijalnu jednačinu :

$$-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{d^2(rR)}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right]R = ER \quad (18.7)$$

Uvodeći radijalnu funkciju $u(r)$ definisanu sa :

$$R(r) \equiv \frac{u(r)}{r} \quad (18.8)$$

, dobijamo :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right]u = Eu \quad (18.9)$$

Ova važna jednačina se zove radijalna Šredingerova jenačina. Ona opisuje jednačinu sa ugaonim impulsom $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ koja se ponaša slično čestici u jednodimenzionalnom efektivnom potencijalu oblika :

$$V_e(r) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \quad (18.10)$$

Ako uporedimo ovaj potencijal sa analognim efektivnim potencijalom u klasičnoj mehanici datim jednačinom (18.3), vidimo da prvi član $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ može biti kinetička energija povezana sa transverzalnim kretanjem ili centrifugalni potencijal koji nastaje iz orbitalnog ugaonog impulsa čestice. Kada rešavamo radijalnu Šredingerovu jednačinu, tražimo da granični uslovi $u(r) = 0$ i $r = 0$ budu nametnuti da se obezbedi da funkcija $R(r) = u(r)/r$, i zbog toga i stvarna trodimenzionalna svojstvena funkcija data sa (18.6) bude konačna u ishodištu. Dodatno, vezana stanja, koja opisuju česticu koja ne može pobeći u beskonačnost moraju zadovoljavati granične uslove :

$$u(r) \to 0 \; za \; r \to \infty$$

Vezana stanja postoje samo ako je efektivni potencijal dat jednačinom (18.10) dovoljno privlačan. Mi ćemo označiti ova stanja kvantnim brojevima $n_r = 0,1,2,\ldots$ koji će prikazivati broj nodova radijalne svojstvene funkcije $u(r)$ između $r = 0$ i $r = \infty$. Ovo znači da vezano stanje čestice u centralnom potencijalu može uvek biti specificirano sa tri kvantna broja n_r, l i m_l i da svojstvena funkcija ima oblik :

$$\psi_{n_r,l,m_l}(r,\theta,\phi) = \frac{u_{n_r,l}(r)}{r}\Upsilon_{l,m_l}(\theta,\phi) \quad (18.11)$$

Koristeći normalizacione uslove iz jednačine (17.27) za sferne harmonike, možemo lako pokazati da svojstvena funkcija $\psi_{n_r,l,m_l}(r,\theta,\phi)$ je normalizovana ako radijalna svojstvena funkcija $u_{n_r,l}(r)$ zadovojava uslov :

$$\int_0^\infty \left|u_{n_r,l}(r)\right|^2 dr = 1 \quad (18.12)$$

Energiju ovih vezanih stanja ćemo označavati sa $E_{n_r,l}$. Razmišljajući o ovoj energiji kao o sumi tri člana, prosečne radijalne kinetičke energije, prosečne transverzalne kinetičke energije i prosečne Kulonove energije, možemo videti da stanje sa najvećim l i najvećim n_r ima najveću energiju. Energija $E_{n_r,l}$ se povećava sa l zato što prosečna kinetička transverzalna energija data sa :

$$\int_0^\infty u_{n_r,l}^*(r)\left(\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right)u_{n_r,l}\,dr$$

, i energija $E_{n_r,l}$, takođe rastu sa n_r, pošto prosečna radijalna kinetička energija koja je data sa :

$$\int_0^\infty u_{n_r,l}^*(r)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}\right)u_{n_r,l}dr$$

, raste kako broj radijalnih nodova raste.

Pre nego što uzmemo u obzir eksplicitne jednačine energetskih nivoa svojstvenih funkcija čestica u Kulonovom potencijalnom polju, podsetimo se kako je dobijane Šredingerova radijalna jednačina. Krucijalni korak je bio da se dobije kvantno stanje sa određenim $E\ i\ L$, i L_z za česticu u centralnom potencijalu. Pošto takvo stanje mora postojati, ovaj korak je imao uspešan ishod, pa nas je odveo do Šredingerove radijalne jednačine, koju smo mogli rešiti dobivši razumne svojstvene vrednosti energije i svojstvene funkcije. U suštini, E, L, i L_z mogu biti uzete kao tri kompatibilne opservable koje na jedinstven način definišu kvantno stanje čestice u centralnom potencijalu. Dodatno, kvantno stanje čestice sa određenom energijom u centrlanom potencijalnom polju ima i druge opservabilne osobine sa određenom vrednošću. To se zove paritet. Za svojstvenu funkciju sa osobinom :

$$\psi(-r) = +\psi(r) \quad (18.13)$$

, se kaže da ima paran paritet, dok za svojstvenu funkciju sa osobinom :

$$\psi(-r) = -\psi(r) \quad (18.14)$$

, se kaže da ima neparan paritet.Koristeći tabelu 17.01 možemo lako pokazati da svojstvena funkcija određenim orbitalnim ugaonim impulsom datim jednačinom (18.6) tj. Sa :

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y_{l,m_l}(\theta,\phi)$$

, ima parni paritet kada je $l = 0$ i $l = 2$ i neparni partitet za $l = 1$. Može se pokazati da, generalno, paritet čestice u centralnom potencijalnom polju je paran kada je l paran i neparan kada je l neparan. Paritet je jedna on najjednostavnijih opservabli u kvantnoj mehanici, ali pošto ova opservabla nema analogiju u klasičnoj mehanici, često se doživljava kao nešto misteriozno. Energija i paritet su kompatibilne observable kad god Hamiltonijan ostane nepromenjen kada se koordinate podrvgnu refleksiji nad ishodištem. Pošto je ovo tačno za sve Hamiltonijane koji ne uključuju slabu nuklearnu interakciju, paritet ima važnu ulogu u klasifikovanju kvantnih stanja u atomskoj, nuklearnoj i fizici čestica.

KVANTNA MEHANIKA VODONIKOVOG ATOMA

U ovom delu ćemo da ukratko opišemo vodonikov atom koristeći koristeći kvantno mehaničke koncepte koje smo uveli u prethodnom poglavlju. Pošto je vodonikov atom esencijalno elektron u Kulonovom potencijalu koji je centralni potencijal, vezana stanja atoma vodonika se mogu uzeti da imaju određene

osobine orbitalnog ugaonog impulsa date sa : $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ i $L_z = m_l\hbar$. Ova stanja imaju talasne funkcije oblika :

$$\Psi_{n_r,l,m_l}(r,\theta,\phi,t) = \psi_{n_r,l,m_l}(r,\theta,\phi)e^{-iE_{n_r,l}t/\hbar}$$

, sa

$$\psi_{n_r,l,m_l}(r,\theta,\phi) = \frac{u_{n_r,l}(r)}{r}\Upsilon_{l,m_l}(\theta,\phi)$$

, gde je $u_{n_r,l}(r)$ svojstvena funkcija data radijalnom Šredingerovom jednačinom (18.9), za elektron u Kulonovom potencijalu :

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

Konkretno, radijalna svojstvena funkcija $u_{n_r,l}(r)$ je rešenje diferencijalne jednačine :

$$\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2u_{n_r,l}(r)}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]u_{n_r,l}(r) = E_{n_r,l}u_{n_r,l}(r) \quad (18.15)$$

, koja zadovoljava granične uslove :

$$u_{n_r,l}(r) = 0 \;\; na\; r = 0\; i\; na\; r = \infty \quad (18.16)$$

Kvalitativne karakteristike energetskih nivoa datuh preko svojstvenih vrednosti definisanih jednačinama (18.15) i (18.16) mogu se dobiti, razmatrajući efektivni potencijal koji se javlja u jednačini (18.15) :

$$V_e(r) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad (18.17)$$

Oblik ovog potencijala za elektrone sa različitim vrednostima kvantnih brojeva l orbitalnog ugaonog impulsa su prikazani na slici 18.02.

Vidimo da, za nenultu vrednost l, efektivni potencijal je privlačan na većim r i odbojan na manjim r. Postavljanjem $dV_e(r)/dr$ na nula, možemo lako pokazati da $V_e(r)$ ima minimalnu vrednost za :

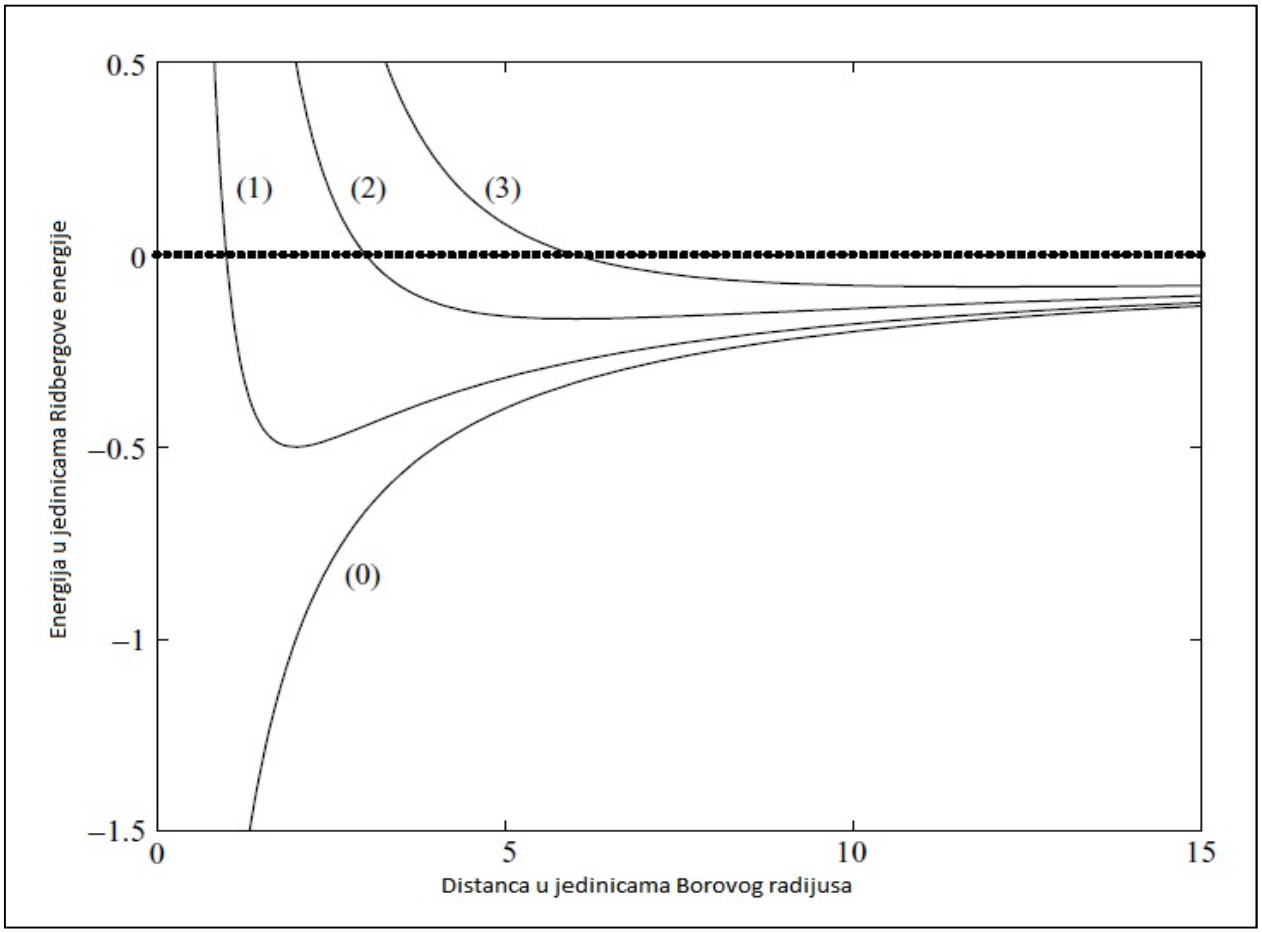
$$V_e(r) = -\frac{E_R}{l(l+1)} \quad na\; r = l(l+1)a_0 \quad (18.18)$$

, gde su a_0 i E_R prirodne jedinice za dužinu i energiju u atomskoj fizici, definisane na na sledeći način : Borov radijus :

$$a_0 = \left[\frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\right]\frac{\hbar^2}{m_e} = 0.529 \cdot 10^{-10}m \quad (18.19)$$

, i Ridbergova energija :

$$E_R = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0} = 13.6\, eV \quad (18.20)$$



Slika 18.02. Efektivni energetski potencijal $V_e(r)$ vodonikovog atoma, za kvantnim brojevima orbitalnog ugaonog impulsa $l = 0,1,2,3$

Minimum dat jednačinom (18.18) implicira da vezana stanja sa ugaonim impulsom $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ imaju energije negde između $E = -E_R/l(l+1)$ i $E = 0$. Ona takođe ukazuje da prostorna mera vezanih stanja svojstvenih funkcija je proširena do velikih distanci kada ugaoni impuls raste. Kada ugaoni impuls u velikoj meri prevazilazi $\hbar$, očekujemo mnogo vezanih stanja sa blisko razmaknutim energetskim nivoima koji odgovaraju kružnim ili eliptičnim orbitama u klasičnoj mehanici. Sa slike 18.02 se takođe vidi da je efektivni potencijal potpuno privlačan za elektron sa nultim ugaonim impulsom. U klasičnoj mehanici takav elektron prosto gura proton i ne postoje stabilna vezivna stanja. Ali u kvantnoj mehanici takva stanja postoje i sa nultim ugaonim impulsom, a čije postojanje možemo razumeti preko principa neodređenosti. Princip neodređenosti govori da elektron lokalizovan u regionu veličine r ima neodređen impuls reda $\hbar/r$ i prosečnu kinetičku energiju koja je najmanje reda $\hbar^2/2m_e r^2$. Ovo znači da najmanja energija elektrona sa nultim orbitalnim ugaonim impulsom u regionu veličine r u blizini protona je ugrubo predstavljena jednačinom :

$$E \approx \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

Sa smanjenjem regiona lokalizacije, energija takođe opada pošto i potencijalna energija opada, ali je na kraju kinetička energija $\hbar^2/2m_e r$ brzo raste. Kao rezultat imamo minimum ukupne energije na :

$$E \approx E_R \quad na\, r \approx a_0$$

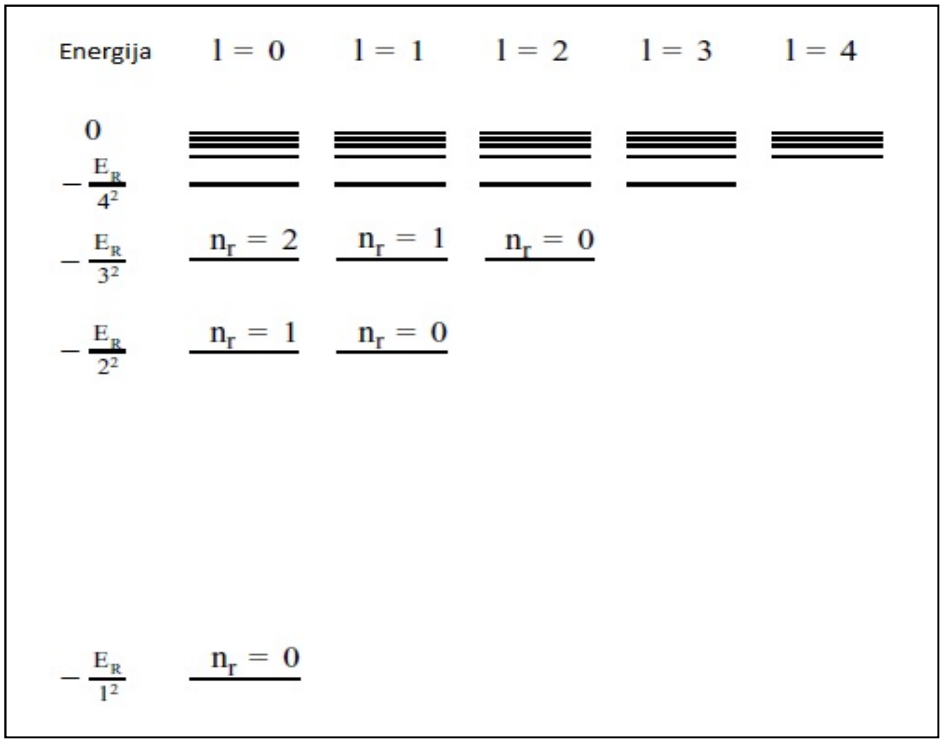
Ovaj minimum obezbeđuje procenu najmanje moguće energije elektrona sa nultim orbitalnim ugaonim momentom u Kulonovom polju i ukazuje da postoje kvantna vezana stanja sa energijama u opsegu : $E \approx E_R$ i $E = 0$.

ENERGETSKI NIVOI I SVOJSTVENE FUNKCIJE

Energetski nivoi i svojstvene funkcije elektrona vezanog Kulonovim potencijalom, se mogu pronaći rešavanjem jednačina (18.15) i (18.16). U cilju fokusiranja na fizičke osobine vodonikovog atoma, razmotrićemo rešenje pre nego pokažemo kako se ono dobija. Elektron sa ugaonim impulsom $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ u Kulonovom potencijalnom polju ima beskonačan broj vezanih stanja sa energijama datim izrazom :

$$E_{n_r,l} = -\frac{E_R}{(n_r + l + 1)^2}\ , sa\ n_r = 0,1,2,3 \qquad (18.21)$$

Kvantni broj n_r se zove radijalni kvantni broj. Ovi energetski nivoi su ilustrovani slikom 18.03.



Slika 18.03 Energetski nivoi dati jednačinom (18.21)

Kao što smo i očekivali postoje vezana stanja sa nultim i nenultim ugaonim impulsom. Takođe se vidi da su energetski nivoi veoma prostorno bliski za velike vrednosti ugaonog impulsa, to ukazuje na paralelu sa klasičnim kontinuumom energije vezanih stanja. Ono što je neočekivano je to da mnogi od energetskih nivoa koji imaju iste vednosti za $n_r + l$ imaju istu energiju. Zbog ove degeneracije, energetsk nivoi vodonikovog atoma su dati sa :

$$E_n = -\frac{E_R}{n^2} \qquad (18.22)$$

, gde je E_R Ridbergova energija, a n kvantni broj definisan sa :

$$n = n_r + l + 1 \qquad (18.23)$$

Ovi kvantni brojevi se zovu glavni kvantni brojevi i mogu uzeti vrednosti $n = 1,2,3 \ldots$. Kasnije ćemo pokazati da radijalna svojstvena funkcija $u_{n_r,l}(r)$ ima tri karakteristike :

- Ranije smo pokazali da svojstvena funkcija čestice u jednodimenzionalnom ograničenom prostoru, sa vezivnom energijom $\epsilon = \hbar^2\alpha^2/2m$ opada eksponencijalno kao $e^{-\alpha x}$. Na sličan način, radijalna svojstvena funkcija elektrona u Kulonovom potencijalnom polju sa vezivnom energijom :
$$\epsilon = \frac{E_R}{n^2} = \frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{n^2 a_0^2}$$
, opada eksponencijalno za veliko r na sledeći način :
$$u_{n_r,l}(r) \propto e^{-r/na_0}$$
- Imajući u vidu prirodu singulariteta na $r = 0$ za centrifugalni potencijal $l(l+1)\hbar^2/2m_e r^2$, ponašanje svojstvene funkcije na malim r je određene orbitalnim ugaonim impulsom i dato je sa
$$u_{n_r,l}(r) \propto r^{l+1}$$
- Na kraju pošto radijalni kvantni broj n_r označava broj nodova između $r = 0$ i $r = \infty$, svojstvena funkcija $u_{n_r,l}(r)$ je proporcionalna polinomu sa n_r nula. Ako ovaj polinom označimo sa $p_{n_r,l}(r)$ imamo :
$$u_{n_r,l}(r) \propto p_{n_r,l}(r)$$

Kombinujući ove tri karakteristike, dolazimo do radijalne svojstvene funkcije u obliku :

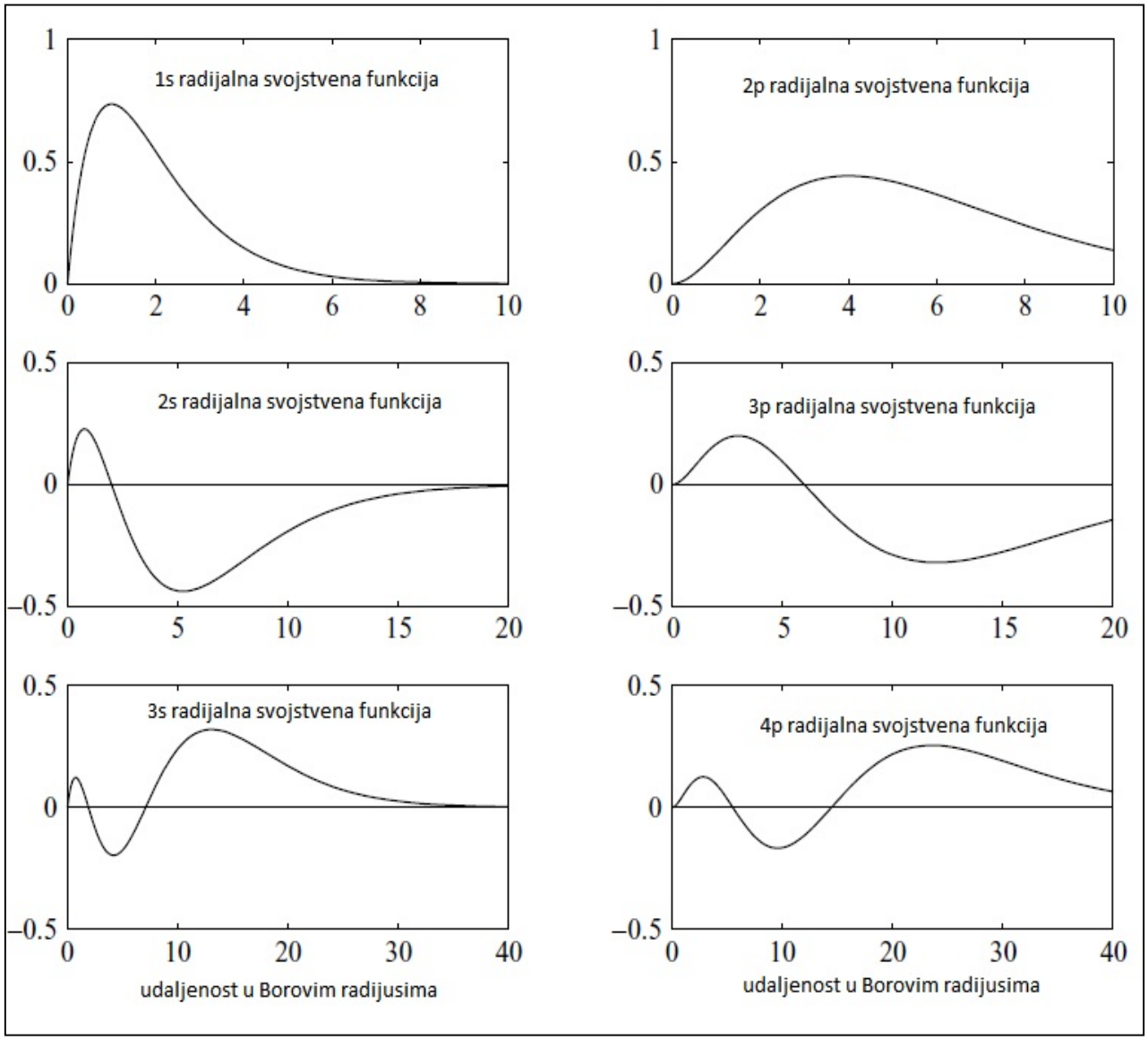
$$u_{n_r,l}(r) = N p_{n_r,l}(r) r^{l+1} e^{-\frac{r}{na_0}} \qquad (18.24)$$

, gde je N konstanta koja osigurava da će normalizacioni uslovi (18.12) biti ispunjeni. Eksplicitni izrazi za radijalne svojstvene funkcije za niske kvantne brojeve ugaonog impulsa l i niske vrednosti za radijalne kvantne brojeve n_r su dati u tabeli 18.01.

Spektroskopska notacija	Radijalna svojstvena funkcija
1s	$u_{0,0}(r) = \frac{2}{\sqrt{a_0}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/a_0}$
2s	$u_{1,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{2a_0}}\left[1-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{a_0}\right)\right]\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$
3s	$u_{2,0}(r) = \frac{2}{3\sqrt{3a_0}}\left[1-\frac{2}{3}\left(\frac{r}{a_0}\right)+\frac{2}{27}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right]\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/3a_0}$
4s	$u_{3,0}(r) = \frac{1}{4\sqrt{a_0}}\left[1-\frac{3}{4}\left(\frac{r}{a_0}\right)+\frac{1}{8}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2-\frac{1}{192}\left(\frac{r}{a_0}\right)^3\right]\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/4a_0}$
2p	$u_{0,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6a_0}}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/2a_0}$
3p	$u_{1,1}(r) = \frac{8}{27\sqrt{6a_0}}\left[1-\frac{1}{6}\left(\frac{r}{a_0}\right)\right]\left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0}$
4p	$u_{2,1}(r) = \frac{1}{16}\sqrt{\frac{5}{3a_0}}\left[1-\frac{1}{4}\left(\frac{r}{a_0}\right)+\frac{1}{80}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right]\left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/4a_0}$
3d	$u_{0,2}(r) = \frac{4}{81\sqrt{30a_0}}\left(\frac{r}{a_0}\right)^3 e^{-r/3a_0}$
4d	$u_{1,2}(r) = \frac{1}{64\sqrt{5a_0}}\left[1-\frac{1}{12}\left(\frac{r}{a_0}\right)\right]\left(\frac{r}{a_0}\right)^3 e^{-r/4a_0}$

Tabela 18.01

Da bi bile u skladu sa konvencijama atomske fizike ove svojstvene funkcije su označene koristeći spektroskopsku notaciju. Ova notacija koristi glavni kvantni broj, $n = n_r + l + 1$ i slovo koje označava vrednost l; slovo s se koristi za $l = 0$, p za $l = 1$, d za $l = 2$ i f za $l = 3$. Istorijsko poreklo ove notacije datira iz najranijih dana atomske fizike kada su spektralne linije bile označavane sa s za oštra, p za glavna, d za difuzna i f za osnovna.



Slika 18.04. Krive radijalnih svojstvenih funkcija

VELIČINE I OBLICI

Veličina i oblik kvantnih stanja atoma vodonika mogu biti određeni posmatranjem najverovatnijih lokacija elektrona u atomu. Za stanje sa svojstvenom funkcijom $\psi_{n_r,l,m_l}(r,\theta,\phi)$ verovatnoća pronalaska elektrona na lokaciji (r,θ,ϕ) u elementu volumena d^3r je :

$$\left|\psi_{n_r,l,m_l}(r,\theta,\phi)\right|^2 d^3r$$

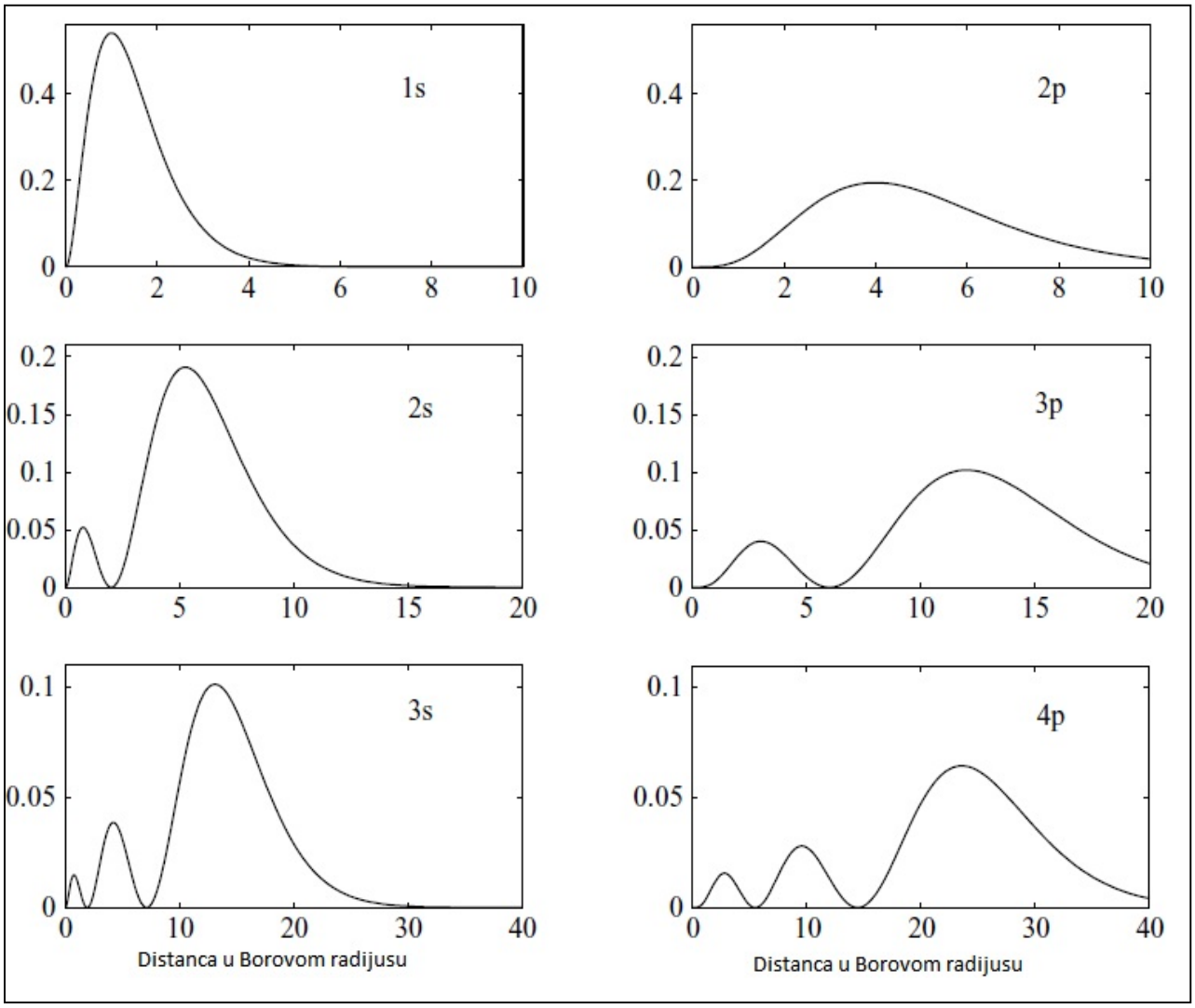
Mi možemo lako naći radijalnu distribuciju verovatnoće elektrona. Da bi to uradili iskoristimo da je $d^3r = r^2 dr d\Omega$, gde je $d\Omega = \sin\theta\, d\theta d\phi$, element prostornog ugla, i izraziti svojstenu funkciju kao :

$$\psi_{n_r,l,m_l}(r,\theta,\phi) = \frac{u_{n_r,l}(r)}{r}\Upsilon_{l,m_l}(\theta,\phi)$$

, gde je $\Upsilon_{l,m_l}(\theta,\phi)$ sferni harmonik koji zadovoljava normalizacione uslove. Verovatnoća pronalaska elektrona da udaljenosti između r i $r+dr$ od jezgra atoma je :

$$\left|\frac{u_{n_r,l}(r)}{r}\right|^2 r^2 dr \int \left|\Upsilon_{l,m_l}(\theta,\phi)\right|^2 d\Omega = \left|u_{n_r,l}(r)\right|^2 dr$$

Dakle, radijalni oblik kvantnog stanja je opisan radijalnom verovatnoćom gustine $\left|u_{n_r,l}(r)\right|^2$. Radijalna raspodela verovatnoće za stanja sa $n_r = 1,2,3$ i sa $l = 0,1$ je prikazana na slici 18.05.



Slika 18.05. Radijalna raspodela verovatnoće za 1s, 2s, 3s, 2p, 3p i 4p za vodonikov atom

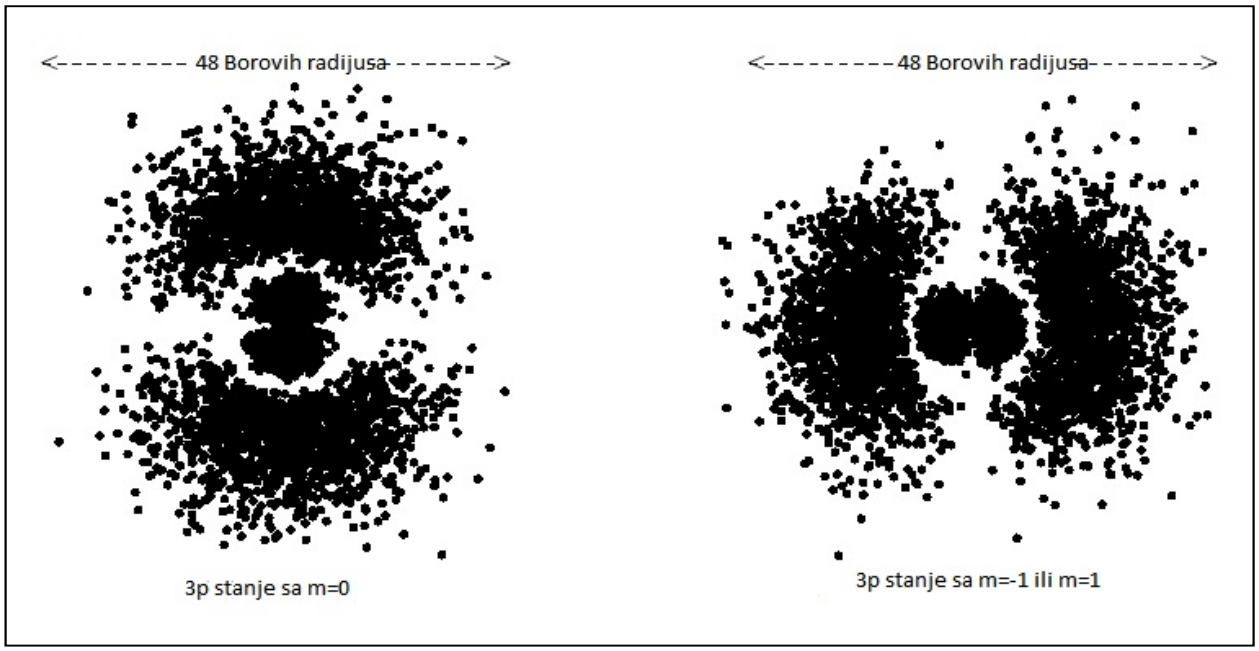
Primetimo da se radijalni stepen povećava kako se povećavaju n_r i l. Ovo može biti potvrđeno razmatranjem značenja radijusa stanja sa kvantnim brojevima n_r i l koji je dat preko jednačine :

$$\langle r\rangle_{n_r,l} = \int_0^\infty r\left|u_{n_r,l}(r)\right|^2 dr$$

Ovaj integral može biti rešen koristeći matematičke osobine svojstvene funkcije $u_{n_r,l}(r)$, što daje izraz :

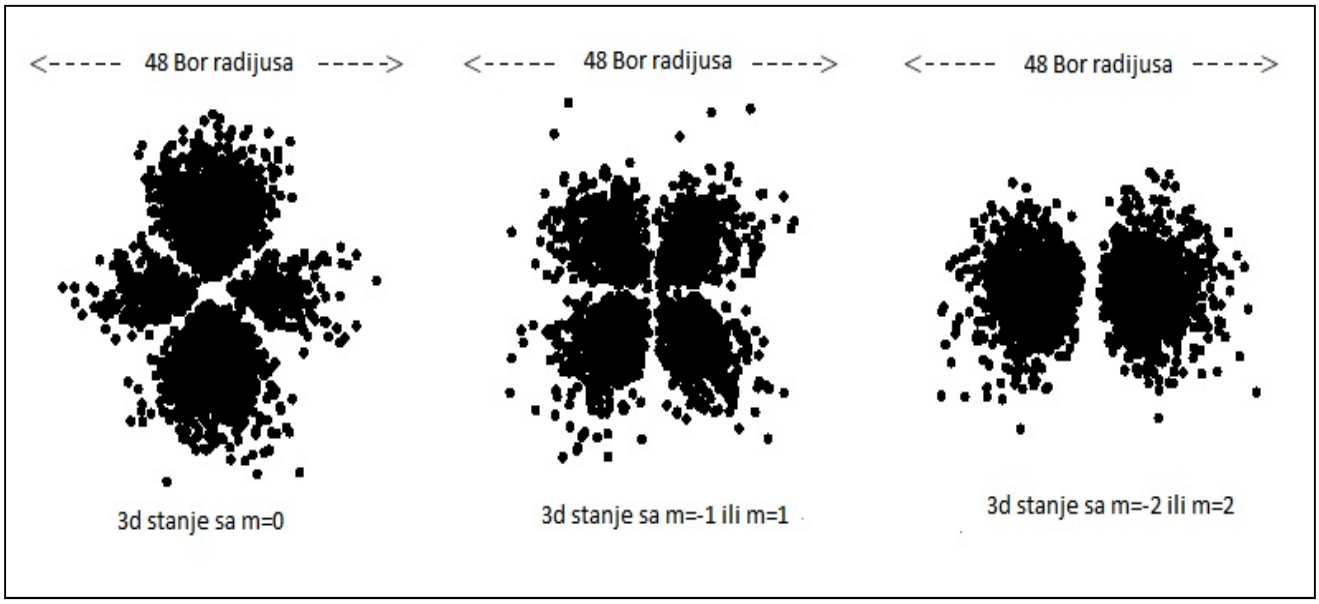
$$\langle r\rangle_{n_r,l} = \frac{1}{2}[3n_r^2 + 6n_r(l+1) + (l+1)(2l+3)]a_0 \qquad (18.25)$$

, koji eksplicitno pokazuje kako radijalni stepen raste sa povećanjem n_r i l. Koristeći eksplicitnu formu za $u_{n_r,l}(r)$ i $\Upsilon_{l,m_l}(\theta,\phi)$ možemo proceniti gustinu verovatnoće $\left|\psi_{n_r,l,m_l}(r,\theta,\phi)\right|^2$ i istražiti i radijalne i ugaone oblike stanja vodonikovog atoma sa kvantnim brojevima n_r, l, m_l. Prvo, primetimo da ugaoni oblici ne zavise od azimutnog ugla ϕ, zato što prema jednačini (17.28) sferni harmonik $\Upsilon_{l,m_l}(\theta,\phi)$ ima ϕ zavisnost $e^{im_l\phi}$. Dakle, raspodela verovatnoće stanja ne zavisi od promena usled rotacija oko z ose. Ovo znači da oblik i veličina može biti u potpunosti određen prikazom najverovatnije pozicije i preko jedne vertikalne ravni koja prolazi kroz z osu kao što se vidi na slikama 18.06 i 18.07.



Slika 18.06 Oblik i veličina 3p stanja vodonikovog atoma

Na slikama 18.06 i 18.07 vidimo oblik i veličinu 3p i 3d stanja atoma vodonika. Stanje 3p na slici 18.06 ima jedan radijalni nod i ugaonu zavisnost datu sa $\left|\Upsilon_{l,m_l}(\theta,\phi)\right|^2$ sa $m_l = 0,1,-1$. Stanje 3d na slici 18.07 nema radijalnih nodova i ugaonog oblika stanja sa $l = 2$.



Slika 18.07 Oblik i veličina 3d stanja vodonikovog atoma

RADIJATIVNI PRELAZI

Kada vodonikov atom interaguje sa elektromagnetnim poljem, kvantna stanja sa kvantnim brojevima n, l, m_l generalno više nisu stacionarna stanja određene energije, pa se između njih mogu odvijati radijacioni prelazi u kojima se elektromagnetna energija apsorbuje ili oslobađa. Najverovatnija radijativna tranzicija se zove tranzicija električnog dipola. Ona je izazvana interakcijom sa E komponentom elektromagnetnog polja sa operatorom koji opisuje moment električnog dipola, elektron- jezgro sistema. Operator električnog dipola je $d = -er$, gde je r operator vektora pozicije za elektron u atomu, a interakcija je data sa :

$$\widehat{H}_I = dE \qquad (18.26)$$

U prisustvu ove interakcije, verovatnoća tranzicije između kvantnih stanja sa kvantnim brojevima n_i, l_i, m_{l_i} i n_f, l_f, m_{l_f} je proporcionalna sa :

$$\left| \int \psi^*_{n_f,l_f,m_{l_f}}(r) \widehat{H}_I \psi_{n_i,l_i,m_{l_i}}(r) d^3r \right|^2 \qquad (18.27)$$

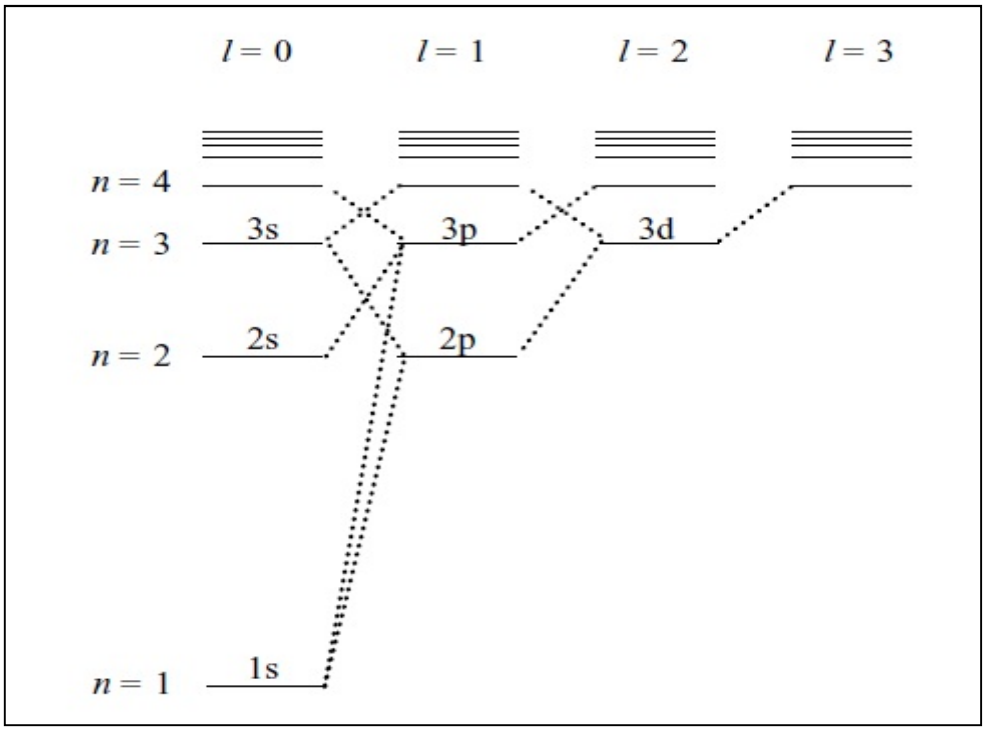
Možemo lako pokazati da tranzicija električnog dipola uvek uključuje promenu pariteta, tako da integral u jenačini (18.27) bude jednak nuli i da početni i krajnji status ima isti paritet. Ovo ćemo da pokažemo razmatrajući efekat promene integracione varijable iz r u $-r$. Interakcija $\widehat{H}_I = -d \cdot E$ menja znak, ali znak svojstvene funkcije $\psi_{n_i,l_i,m_{l_i}}(r)$ ili $\psi_{n_f,l_f,m_{l_f}}(r)$ je nepromenjen ako svojstvena funkcija ima paran paritet, odnosno menja znak ako je paritet neparan kao u jednačinama (18.13) i (18.14). Dakle kada obadve svojstvene funkcije imaj isti paritet, integrant u jednačini (18.27) menja znak kada integraciona varijabla r se promeni u –r što znači da integral mora da bude jednak nuli.

Takođe može biti pokazano , konstatacijom da ugaona zavisnost svojstvenih funkcija $\psi_{n_i,l_i,m_{l_i}}(r)$ i $\psi_{n_f,l_f,m_{l_f}}(r)$ daje sferne harmonike, da integral u (18.27), a samim tim i verovatnoća tranzicije, je nula osim kada je $\Delta l = l_f - l_i$ jednako +1 ili -1. To znači da sve tranzicije električnih dipola u atomu vodonika takođe zadovoljavaju *pravilo izbora :*

$$\Delta l = \pm 1 \qquad (18.28)$$

Tranzicija električnih dipola između nižih kvantnih stanja vodonikovog atoma je prikazana isprekidanim linijama na slici 18.08. , gde se spektroskopska notacija 1s,2s,2p itd koristi da označi nivoe koji odgovaraju stanjima za različite vrednosti osnovnih kvantnih brojeva n i kvantnih brojeva orbitalnog ugaonog momenta l. Na primer, stanju 2s odgovara kombinacija $n = 2$ i $l = 0$, a $2p$ odgovara kombinaciji $n = 2$ i $l = 1$. Tranzicija prikazana na slici 18.08 može biti indukovana ili spontana. Indukovana tranzicija između stanja sa energijama E_{n_i} i E_{n_f} javljaju se kada atom interaguje sa elektromagnetnim poljem koje osciluje sa ugaonom frekvencijom ω koja zadovoljava rezonantne uslove

$$\hbar\omega = \left|E_{n_f} - E_{n_i}\right|$$



Slika 18.08 Radijativna tranzicija na nižim energetskim nivoima atoma vodonika

Elektromagnetna energija se apsorbuje kada je $E_{n_f} > E_{n_i}$ a ako je $E_{n_i} > E_{n_f}$ energija se emituje. Spontanu tranziciju naizgled ne izaziva ništa, ali je ona stvarno izazvana interakcijom atoma sa kvantizovanim radiacionim poljem koje je uvek prisutno, čak i kada je atom potpuno izolovan. Kao rezultat ove interakcije, atom sa energijom E_{n_i} se raspada na atom energije E_{n_f} uz emisiju fotona energije $\epsilon = E_{n_i} - E_{n_f}$. Takvi prelazi dovode do spektralnih linija sa talasnom dužinom λ datom sa :

$$\frac{hc}{\lambda} = E_R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \qquad (18.29)$$

Ove linije formiraju seriju linija u ultraljubičastom opsegu koja se zove Limanova serija, sa talasnim dužinama datim sa :

$$\frac{hc}{\lambda} = E_R\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \quad gde\ je\ n_i = 2,3,4 \ldots$$

, i seriju linija u vidljivom delu spektra koja se zove Balmerova serija sa talasnim dužinama datim sa :

$$\frac{hc}{\lambda} = E_R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \quad gde\ je\ n_i = 3,4,5 \ldots$$

, i druge serije sa većim talasnim dužinama. Analiza slike 18.08 pokazuje da 2s stanje atoma vodonika se ne može raspasti preko radijativnog prelaza električnog dipola pošto $2s \rightarrow 1s$ tranzicija bi mogla narušiti pravilo $\Delta l = \pm 1$. U stvari 2s stanje je metastabilno stanje sa dugim životnim vekom, koje se na kraju raspada na 1s stanje preko mehanizma koji je mnogo manje verovatan od radijativnog prelaza električnog dipola. Dok je srednje vreme spontanog $2p \rightarrow 1s$ prelaza $1.6 \cdot 10^{-9}\ s$, srednje vreme spontanog $2s \rightarrow 1s$ prelaza je 0.14s.

EFEKAT REDUKCIJE MASE

Već smo napomenuli da je masa jezgra atoma vodonika previše velika da bi se ignorisalo kretanje jezgra. U stvari, ovo kretanje daje povoda da mali ali važan efekat može biti inkorporiran uvođenjem koncepta redukcije mase elektron-jezgro sistema. Da bi razumeli redukciju mase u atomu vodonika razmotrimo klasičnu energiju elektrona mase m_e i jezgra mase m_N koji su u interakciji preko Kulonovog potencijala :

$$E = \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{p_N^2}{2m_N} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

, gde su p_e i p_N inteziteti impulsa elektrona i jezgra, a r je udaljenost između jezgra i elektrona. U okviru centra mase, možemo smatrati da je $p_e = p_N = p$ pa dobijamo jednačinu za energiju u obliku :

$$E = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\ , \qquad gde\ je\ \ \mu = \frac{m_e m_N}{m_e + m_N}$$

Ova jednačina pokazuje da klasičan sistem elektron – jezgro u okviru centra mase deluju kao pojedinačna čestica mase μ. Ova masa se zove redukovana masa elektron-jezgro sistema. Na sličan način, kvantni elektron-jezgro sistem takođe deluje kao pojedinačna čestiva mase μ. Ovo znači da možemo kretanje jezgra uzeti u obzir prostom zamenom mase elektrona sa masom μ. Konkretno, dužinska i energetska skala data Borovim radijusom a_0 i Ridbergovom energijom E_R se malo modufikuju i postaju :

$$a_0' = \left[\frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\right]\frac{\hbar^2}{\mu} = \frac{m_e}{\mu}a_0$$

, i

$$E_R' = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0'} = \frac{\mu}{m_e} E_R$$

, pa se svi rezultati dati jednačinama (18.21),(18.22),(18.24) i (18.25) u tabeli 18.01 i na slikama 18.03, 18.04 i 18.05 modifikuju na ovaj način. Ono što je najvažnije je da su modifikovani energetski nivoi atoma vodonika dati sa :

$$E_n' = -\frac{E_R'}{n^2} = \frac{\mu}{m_e}\frac{E_R}{n^2} \qquad (18.30)$$

Efekat reukcije mase atoma vodonika je vidljiv kada se uporede spektralne linije izvornog vodonika sa linijama teškog vodonika. Za izvorni vodonik, jezgro je proton sa masom $1836m_e$, dok je atom teškog vodonika deuterijum sa masom $3671m_e$, a redukcija mase je $(3671/3672)m_e$. Ova malena razlika u redukovanim masama ova dva atoma dovodi do vidljivih razlika u talasnim dužinama spektralnih linija emitovanih od strane ovih atoma. Na primer, H_α linija Balmerove serije koja nastaje prelazom iz stanja sa $n = 3$ na stanje sa $n = 2$ ima talasnu dužinu λ datu sa :

$$\frac{hc}{\lambda} = \frac{\mu}{m_e} E_R \left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2}\right]$$

Za izvorni vodonik ovo daje $\lambda = 656.4686\, nm$, dok za teški vodonik daje $\lambda = 656.2899\, nm$. U stvari, Herold Urei je 1934. godine otkrio teški vodonik u eksperimentu koji je pokazao da svaki red Balmerove serije ima prateću bledu liniju zahvaljujući malim primesama teškog vodonika koji je prisutan u izvornom vodoniku.

Relativistički efekti

U ovom delu ćemo da pokažemo, da iako dobra aproksimacija da je elektron u vodonikovom atomu nerelativistički, da ipak relativistički efekti dovode do malih ali značajnih korekcija u energetskim nivoima. Potvrdićemo da je elektron u vodonikovom atomu aproksimativno nerelativistički preko procene njegovog prosečnog impulsa. Pošto je neodređenost pozicije elektrona u vodonikovom atomu reda Borovog radijusa a_0, neodređenost u njegovom impulsu, pa dakle i u prosečnom impulsu je reda $p_0 = \hbar/a_0$. Koristeći jenačinu (18.19) imamo :

$$p_0 = \alpha m_e c \qquad (18.31)$$

, gde je α bezdimenziona konstanta koju zovemo konstanta fine strukture definisana preko jednačine :

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137.0359895} \qquad (18.32)$$

Mala numerička vrednost konstante fine strukture ima važne implikacije u atomskoj fizici. Ona implicira da atomski elektroni, slično elektronu u atomu vodonika, imaju impuls koji je mali u poređenju sa $m_e c$ pa

je samim tim nerelativistička aproksimacija dovoljno dobra. Možemo proceniti intezitet relativističke korekcije za atom vodonika razmatrajući relaciju između relativističke energije ϵ i impulsa p elektrona :

$$\epsilon = \sqrt{m_e^2 c^4 + p^2 c^2}$$

Ako je $p \ll m_e$ možemo iskoristiti binomnu teoremu da dobijemo aproksimativni izraz :

$$\epsilon = m_e c^2 + \frac{p^2}{2m_e} - \frac{1}{8}\left(\frac{p}{m_e c}\right)^4 m_e c^2$$

Prvi član je energija mase mirovanja, drugi je nerelativistička kinetička energija, a treći član je relativistička korekcija kinetičke energije. Napomenimo da pošto je prosečan impuls elektrona u vodonikovom atomu reda $p_0 = \alpha m_e c$, relativistička korekcija za njegovu kinetičku energiju je reda :

$$\langle E_{rel} \rangle \approx -\frac{1}{8}\left(\frac{p}{m_e c}\right)^4 m_e c^2 = -\frac{1}{8}\alpha^4 m_e c^2 \quad (18.33)$$

Korekcije slične veličine takođe nastaju iz interakcije spina magnetnog impulsa elektrona sa magnetnim poljem, koja je izazvana relativnim kretanjem jezgra i elektrona. Ova interakcija se zove spin-orbita interakcija. Intezitet spin-orbita interakcije se može proceniti posmatranjem klasičnog elektrona koji se kreće oko jezgra na udaljenosti r. Ako elektron ima brzinu v i orbitalni ugaoni impuls $L = m_e r v$, biće mu potrebno vreme :

$$\tau = \frac{2r\pi}{v} = \frac{2\pi m_e r^2}{L}$$

, da kompletira orbitu. Baš kao što nam se čini Sunce obilazi oko Zemlje, tako se i elektronu čini da se jezgro kreće oko njega na udaljenosti r periodom τ. Pošto jezgro ima naelektrisanje e, električna struja $I = e/\tau$ okružuje elektron praveći strujnu petlju. Koristeći standardne formule za magnetno polje u centru kružne strujne petlje radijusa r, $B = \mu_0 I/2r$ i relaciju $c^2 = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$, dobijamo da elektron oseća magnetno polje inteziteta :

$$B = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 m_e c^2 r^3} L \quad (18.34)$$

Pošto elektron ima spin magnetni impuls :

$$\mu = -2\frac{e}{2m_e} S$$

, postoji energija interakcije data sa :

$$E_{mag} = -\mu B = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_e^2 c^2 r^3} L \cdot S$$

Ova procena nam daje pravi red inteziteta spin-orbita interakcije. Mnogo pažljivijom kalkulacijom koja uzima u obzir ubrzanje elektrona uvodi se faktor ½ što daje :

$$E_{mag} = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 m_e^2 c^2 r^3} L \cdot S \qquad (18.35)$$

Kvantitativni efekti spin-orbita interakcije na energetske nivoe vodonikovog atoma mogu biti dobijeni procenom očekivanih vrednosti E_{mag}. U svakom slučaju dva važna aspekta spin-orbita interakcije su :

- Spin-orbita interakcija je zaista relativistički efekat i ovo možemo potvrditi tako što ćemo pokazati da ona dovodi do korekcije koja je uporediva sa relativističkom korekcijom kinetičke energije datom sa jednačinom (18.33).

  $$\langle E_{rel} \rangle \approx -\frac{1}{8}\alpha^4 m_e c^2$$

  Koristeći konstantu fine strukture α datu preko jednačine (18.32) , jednačinu (18.35) možemo napisati u obliku :

  $$E_{mag} = \alpha \frac{\hbar}{2m_e^2 c} \frac{L \cdot S}{r^3}$$

  Za niže energetske nivoe vodonikovog atoma, možemo pretpostaviti da je očekivana vrednost izraza $\frac{L \cdot S}{r^3}$ reda $\hbar^2/a_0^3$. Ako napišemo izraz za Borov radijus preko konstante fine strukture :

  $$a_0 = \frac{1}{\alpha}\frac{\hbar}{m_e c}$$

  , nalazimo da je energija spin-orbita interakcije za niže energetske nivoe atoma vodonika reda :

  $$\langle E_{mag} \rangle \approx \alpha^4 m_e c^2$$

- Spin-orbita interakcija implicira da kvantna stanja vodoniovog atoma sa određenom energijom imaju određene vrednosti za $J^2, L^2\ i\ S^2$, gde je $J = L + S$, ukupan ugaoni impuls usled orbitalnog i spin ugaonog impulsa elektrona. Ovo možemo potvrditi iz sledećih jednačina :

  $$J \cdot J = (L + S)(L + S) = L^2 + S^2 + 2L \cdot S$$

  , što pokazuje da je spin-orbita interakcija proporcionalna sa :

  $$L \cdot S = \frac{J^2 - L^2 - S^2}{2}$$

Kao kvantitativnu ilustraciju kombinovanog efekta relativističke korekcije kinetičke energije i relativističke spin-orbita interakcije u vodonikovom atomu, razmotrićemo kvantno stanje sa glavnim kvantnim brojem $n = 2$. Zbog spin-orbita interakcije, ova stanja će imati određenu energiju ako imaju određenu magnitudu spina, ukupni i orbitalni impuls dat sa

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar\,, \qquad L = \sqrt{l(l+1)}\hbar\ \ i\ \ J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$$

, gde su s, l, j kvantni brojevi. Pravilo za sabiranje spinova i ugaonih impulsa implicira da, generalno j može uzeti vrednosti :

$$j = l + s, l + s - 1, \dots, |l - s|$$

Za atom vodonika stanja sa $n = 2$, orbitalni kvantni broj l može biti 0 ili 1. Stanja sa $n = 2$ sa $l = 0$ i $s = 1/2$ imaju $j = 1/2$ i označavaju se sa $2s_{1/2}$, $n = 2$ stanja sa $l = 1$ i $s = 1/2$ imaju $j = 1/2$ ili $j = 3/2$ i označavaju se sa $2p_{1/2}$ ili $2p_{3/2}$. Ako je spin-orbita interakcija odsutna, sva stanja vodonikovog atoma sa $n = 2$ bi imala istu energiju :

$$E_2 = -\frac{E_R}{2^2} = -\frac{\alpha^2}{8} m_e c^2$$

, gde je E_R Ridbergova energija a α konstanta fine strukture. Kada se relativistička i spin-orbita korekcija izračunavaju koristeći teoriju koja se zove perturbaciona teorija, za ova stanja se nalazi da imaju energije koje zavise od kvantnih brojeva l, s i j. Ove energije su date preko izraza :

$$E(2s_{1/2}) = E_2 - \frac{5}{64}\alpha^4 m_e c^2$$

$$E(2p_{1/2}) = E_2 - \frac{5}{64}\alpha^4 m_e c^2$$

$$E(2p_{3/2}) = E_2 - \frac{1}{64}\alpha^4 m_e c^2$$

Napomenimo da razlika u energijama $2p_{1/2}$ i $2p_{3/2}$ stanja može biti verifikovana posmatranjem malih razlika u talasnim dužinama zračenja emitovanog tranzicijom $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ i $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$.

IDENTIČNE ČESTICE

U klasičnoj fizici se u načelu može pratiti kretanje čestica i znati koja je koja čak i ako su potpuno iste. U kvantnoj mehanici to nije moguće. Kvantna čestica sa naodređenom pozicijom i impulsom ne može da se prati, i ako su i identične one su različite. Ova različitost identičnih čestica je fundamentalni princip kvantne fizike koji nema analogiju u klasičnom svetu. Ovde ćemo pokazati kako ovaj princip dovodi do važnog koncepta razmene simetrija i do klasifikacije kvantnih čestica u dva tipa koja se zovu bozoni i fermioni. Ovde ćemo primarno pokušati razviti razumevanje identičnosti čestica na primeru dve čestice , p i q. Sve osobine takvog sistema mogu biti izražene preko dvočestične talasne funkcije $\Psi(r_p, r_q, t)$. Na primer objedinjena verovatnoća pronalaska čestice p u elementu zapremine d^3a na $r_p = a$, i čestice q u elementu zapremine d^3b , na $r_q = b$ je data sa :

$$|\Psi(a, b, t)|^2 d^3a d^3b \qquad (19.1)$$

Kada su čestice identične, talasna funkcija mora dovesti do identičnih osobina svaku česticu. U stvari, raspodela verovatnoće za pronalaženje čestice p na a i čestice q na b, mora biti ista kao raspodela verovatnoće pronalaženja čestice q na a i čestice p na b. Ovaj zahtev ispunjavaju talasne funkcije koje zadovoljavaju uslov :

$$|\Psi(a,b,t)|^2 = |\Psi(b,a,t)|^2 \qquad (19.2)$$

Kada su ovi uslovi za prihvatljivu talasnu funkciju zadovoljeni, $|\Psi(a,b,t)|^2 d^3a d^3b$ je verovatnoća da će se jedna ili druga čestica naći na a a druga na b. Uslov (19.2) govori da funkcija $\Psi(a,b,t)$ se razlikuje od funkcije $\Psi(b,a,t)$ najviše za fazni faktor, tj mora biti :

$$\Psi(a,b,t) = e^{i\delta}\Psi(b,a,t) \qquad (19.3)$$

Međutim, fazni faktor $e^{i\delta}$ može uzeti samo dve moguće vrednosti. Ovo možemo pokazati konstatacijom da zamena a i b u jednačini (19.3) daje :

$$\Psi(b,a,t) = e^{i\delta}\Psi(a,b,t)$$

, što ako se ponovo iskoristi jednačina (19.3) daje :

$$\Psi(b,a,t) = e^{i\delta}e^{i\delta}\,\Psi(b,a,t)$$

Ov ajednačina govori da $e^{i\delta}e^{i\delta}$ mora biti jednako jedinici, tj da fazni faktor može imati dve vrednosti, +1 ili -1. Dakle talasna funkcija za dve identične čestice može biti ili simetrična funkcija :

$$\Psi(a,b,t) = +\Psi(b,a,t) \qquad (19.4)$$

, ili asimetričan funkcija :

$$\Psi(a,b,t) = -\Psi(b,a,t) \qquad (19.5)$$

Za ove funkcije kažemo da imaju definitivnu razmenu simetrije, osobina koja osigurava da se dve čestice ne mogu razlikovati.

Fizičke konsekvence

Pokazali smo da identične kvantne čestice moraju biti opisane talasnim funkcijama koje su simetrične ili antisimetrične kada se čestice zamene. Mi ćemo ovde da pokušamo da sagledamo fizičke konsekvence ove razmene simetrije razmatrajući jednostavan primer dve identične čestice mase m u jednodimenzionalnom harmonijskom potencijalnom oscilatoru. Pretpostavićemo da ove čestice nisu u direktnoj interakciji sa drugim česticama tako da je njihov Hamiltonijan operator:

$$\hat{H}(x_p,x_q) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_p^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_q^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x_q^2 \qquad (19.6)$$

Svaka od ovih čestica može zauzeti jednočestično stanje predstavljeno svojstvenom funkcijom ψ_n , sa energijama datim sa $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ sa $n = 0,1,2,3 \ldots$. Prvo ćemo da razmotrimo obadve čestice u jednočestičnom stanju. Ako ovo stanje ima kvantni broj n, ukupna energija dve čestice je :

$$E = E_n + E_n = (2n+1)\hbar$$

, a dvočestična talasna funkcija sa ovom energijom je :

$$\Psi^{(S)}(x_p, x_q, t) = \psi_n(x_p)\psi_n(x_q)e^{-i(E_n+E_n)t/\hbar} \qquad (19.7)$$

, gde je ψ_n svojstvena funkcija čestice energije E_n u harmonijskom potencijalnom oscilatoru. Imamo označenu dvočestičnu talasnu funkciju sa subskriptom S što znači da je ona simetrična u odnosu na čestičnu zamenu, što dalje znači da je prihvatljiva funkcija za dve identične čestice. Napomenimo da je nemoguće konstriusati antisimetričnu talasnu funkciju ako su obadve čestice u istom jednočestičnom stanju. Ovo znači da dve identične čestice sa antisimetričnom talasnom funkcijom ne mogu zauzeti isto jednočestično stanje. Sada posmatajmo dve identične čestice u dva različita jednočestična stanja. Kada čestice zauzmu stanja sa kvantnim brojevima n i n', njihova energija je :

$$E = E_n + E_{n'} = (n + n' + 1)\hbar\omega$$

Talasna funkcija za dve različite čestice sa ovom energijom može biti data u obliku :

$$\Psi_1^{(D)}(x_p, x_q, t) = \psi_n(x_p)\psi_{n'}(x_q)e^{-\frac{i(E_n+E_{n'})t}{\hbar}} \qquad (19.8)$$

$$\Psi_2^{(D)}(x_p, x_q, t) = \psi_n(x_p)\psi_{n'}(x_q)e^{-\frac{i(E_n+E_{n'})t}{\hbar}} \qquad (19.9)$$

, ili linearnom kombinacijom u formi :

$$\Psi^{(D)}(x_p, x_q, t) = c_1\Psi_1^{(D)}(x_p, x_q, t) + c_2\Psi_2^{(D)}(x_p, x_q, t) \quad (19.10)$$

, gde su c_1 i c_2 konstante. Oznaka D se koristi da bi označila da ove talasne funkcije se koriste da opišu različite čestice. Napomenimo da jednačina (19.10) označava čudnu talasnu funkciju u kojoj obadve čestice su povezane sa jednočestičnim stanjima. Zaista, pod pretpostvkom da su talasne funkcije Ψ_1^D i Ψ_2^D normalizovane, $|c_1|^2$ daje verovatnoću da je čestica p u stanju n a čestica q u stanju n'. Pošto se kvantna stanja sa talasnim funkcijama sličnim (19.10) zovu isprepletena stanja, mi ćemo se pozivati na jednačine (19.8) i (19.9) kao na nepretpletena stanja. Da li se čestice razlikuju ili ne, da li su prepletene ili ne, kvantna stanja zavise od procesa koji ih dovode do tih stanja. Talasne funkcije dve identične čestice, moraju imati definisanu razmenu simetrije, i za čestice sa energijom $E_n + E_n'$ ova talasna funkcija je nužno isprepletena talasna funkcija. To može biti simetrična talasna funkcija oblika :

$$\Psi^{(S)}(x_p, x_q, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_n(x_p)\psi_{n'}(x_q) + \psi_n(x_q)\psi_{n'}(x_p)\right]e^{-i(E_n+E_{n'})t/\hbar} \quad (19.11)$$

, ili asimetrična funkcija u formi :

$$\Psi^{(S)}(x_p, x_q, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_n(x_p)\psi_{n'}(x_q) - \psi_n(x_q)\psi_{n'}(x_p)\right]e^{-i(E_n+E_{n'})t/\hbar} \quad (19.12)$$

Ove obadve talasne funkcije reprezentuju stanja u kojima je svaka čestica podjednako povezana sa obadva jednočestična stanja. Ove funkcije ćemo da iskoristimo da pokažemo da razmena simetrije dovodi do iznenađujućih tendencija identičnih čestica ili da se gomilaju ili da se međusobno izbegavaju. Da bi to uradili uzećemo da je $x_p = x_q = x_0$ i porediti vrednosti talasnih funkcija za različite i identične čestice kada čestice imaju istu lokaciju x_0. Za različite čestice sa neisprepletenim talasnim funkcijama (19.8) i (19.9), dovijamo :

$$\Psi_{1,2}^{(D)}(x_0, x_0, t) = \psi_n(x_0)\psi_{n'}(x_0)e^{-i(E_n+E_{n'})t/\hbar}$$

Za identične čestice sa simetričnom isprepletenom talasnom funkcijom (19.11) dobijamo :

$$\Psi_{1,2}^{(S)}(x_0, x_0, t) = \sqrt{2}\psi_n(x_0)\psi_{n'}(x_0)e^{-i(E_n+E_{n'})t/\hbar}$$

, i za identične čestice sa antisimetričnom isprepletenom talasnom funkcijom (19.12) dobijamo :

$$\Psi^{(A)}(x_0, x_0, t) = 0$$

Ove jednačine pokazuju da, ako su sve ostale okolnosti jednake, dve identične čestice sa simetričnom talasnom funkcijom imaju duplo veću verovatnoću da se nađu na istoj lokaciji, kao i dve različite čestice sa neisprepletenom talasnom funkcijom, i da dve identične čestice sa antisimetričnom talasnom funkcijom se nikada neće naći na istoj lokaciji. Talasno-mehaničko poreklo ovakvog ponašanja je interferencija, bilo konstruktivna u simetričnoj talasnoj funkciji ili destruktivna u antisimetričnoj talasnoj funkciji. Tendencija identičnih čestica za zajedništvom ili izbegavanjem može biti ilustrovana pažljivijim razmatranjem primera, gde čestica zauzima stanja harmonijskog oscilatora sa $n = 0$ i $n' = 1$. Ako koristimo talasne funkcije iz tabele 15.1 i koristimo koordinate

$$x = x_p - x_q \;\; i \;\; X = \frac{x_p + x_q}{2}$$

, dobijamo sledeće izraze za simetrične i antisimetrične talasne funkcije (19.11) i (19.12) :

$$\Psi^{(S)}(x, X, t) = \frac{2}{a^2\sqrt{\pi}} e^{-x^2/4a^2} X e^{-X^2/a^2} e^{-i(E_0+E_1)t/\hbar}$$

$$\Psi^{(A)}(x, X, t) = \frac{-1}{a^2\sqrt{\pi}} x e^{-x^2/4a^2} e^{-X^2/a^2} e^{-i(E_0+E_1)t/\hbar}$$

Kvadrat modula svake od ovih funkcija daje verovatnoću gustine za čestice da su razdvojene za x i da je centar mase lociran u X. Integraljenjem po svim mogućim vrednostima X, možemo pronaći verovatnoću razdvojenosti x. Pravolinijske kalkulacije pokazuju da je verovatnoća razdvojenosti sa magnitudom između $|x|$ i $|x + dx|$:

$$P^{(S)}(x)dx = \frac{2}{a\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2a^2} dx \qquad (19.13)$$

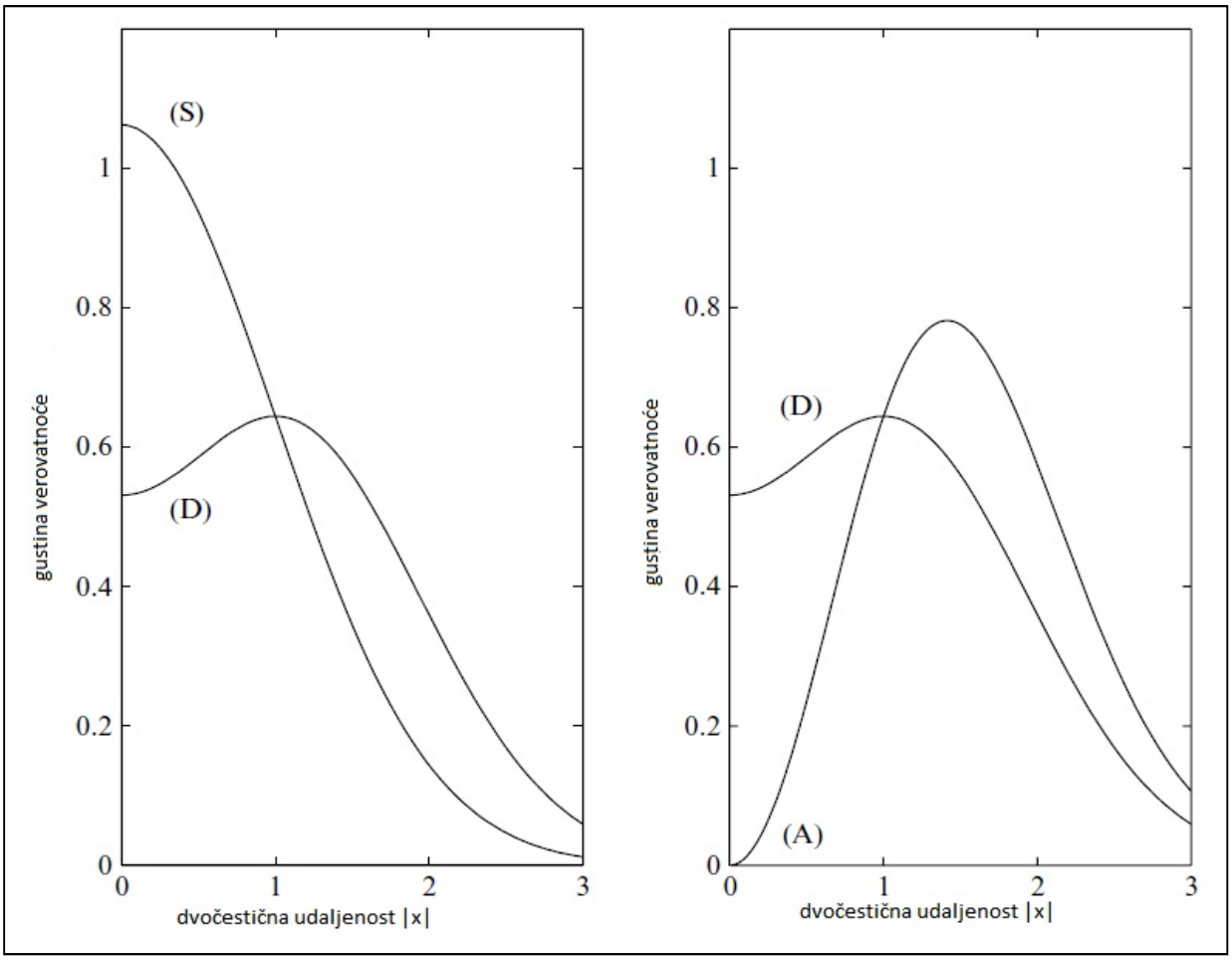
, za simetričnu talasnu funkciju i :

$$P^{(A)}(x)dx = \frac{2}{a\sqrt{2\pi}}\frac{x^2}{a^2}e^{-x^2/2a^2}dx \quad (19.14)$$

, za antisimetričnu talasnu funkciju. Odgovarajuća verovatnoća za dve različite čestice, sa nepreplетenim talasnim funkcijama, sličnim onim datim jednačinama (19.9) i (19.8) je :

$$P^{(D)}(x)dx = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}}\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)e^{-x^2/2a^2}dx \quad (19.15)$$

Verovatnoće gustina $P^{(S)}(x)$, $P^{(A)}(x)$ i $P^{(D)}(x)$ su prikazane na slici 19.01. Levi grafikon prikazuje čestice koje se gomilaju ako imaju simetričnu talasnu funkciju, grafikon s desne strane prikazuje identične čestice koje izbegavaju jedne druge ako imaju antisimetričnu talasnu funkciju. Slično ponašanje bi mogli pokazati za različite čestice ali kada specifični fizički procesi dovode do formiranja simetričnih ili antisimetričnih prepletenih stanja.



Slika 19.01 Razdvojenost dve identične čestice u jednodimenzionalnom potencijalnom harmonijskom oscilatoru.

Treba naglasiti da ove tendencije ka gomilanju ili odvajanju nisu posledice privlačne ili odbojne sile između čestica. Zaista, u našem ilustrativnom primeru, čestice se podvrgavaju Hamiltonijanu (19.6), u kojem ne postoji direktna interakcija između čestica. Ove tendencije su rezultat razmene simetrije koja uvek postoji za identične kvantne čestice.

Takođe treba primetiti na slici 19.01, da efekti razmene simetrije postaju manje važni kako se razdvojenost čestica povećava. Ovo ukazuje na činjenicu da ako identične čestice držimo razdvojenim one postaju skoro različite.

RAZMENA SIMETRIJE SA SPINOM

Pokazali smo da nemogućnost razlikovanja identičnih čestica dovodi do talasnih funkcija sa određenom razmenom simetrije. Ostaje da još razmotrimo okolnosti pod kojima talasna funkcija postaje simetrična ili anti simetrična. Ove okolnosti zavise od spina čestice, ali za razumevanje uloge spina u određivanju razmene simetrije, potrebno je da proširimo našu predstavu kvantnih stanja tako da uključimo i opis spina čestice. Za česticu kažemo da ima spin s ako magnituda i z komponenta njenog unutrašnjeg ugaonog impulsa je data sa :

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \;\; i \; S_z = m_s\hbar \, , gde \; je \; m_s = \begin{cases} +s \\ +(s-1) \\ . \\ . \\ . \\ -(s-1) \\ -s \end{cases}$$

Na primer, elektron, proton i neutron imaju spin $s = 1/2$,jezgro deuterijuma ^2H ima spin $s = 1$, a jezgro helijuma ^4He ima spin $s = 0$. Prisetimo se da osobine orbitalnog ugaonog impulsa čestice p sa orbitalnim ugaonim impulsom $\sqrt{l(l+1)}\hbar$ mogu biti opisane koristeći $2l+1$ svojstvenih funkcija $\Upsilon_{l,m_l}(\theta_p, \phi_p)$. Slično sve osobine unutrašnjeg ugaonog impulsa čestice p sa spinom $\sqrt{s(s+1)}\hbar$ mogu biti opisane sa $2s+1$ svojstvenih funkcija $\chi_{s,m_s}(p)$ sa $m_s = -s, -s+1, \dots, +s$. U stvari, uopšteno stanje spina ima formu :

$$\chi(p) = \sum_{m_s=-s}^{s} c_{m_s}\chi_{s,m_s}(p)$$

, gde je $|c_{m_s}|^2$ verovatnoća da čestica ima z komponentu spina jednaku $m_s\hbar$. Kada su prostorne i osobine spina čestice nezavisne jedne od drugih, kvantno stanje možemo predstaviti u obliku :

$$\Phi(p) = \psi(r_p)\chi(p)$$

Na primer, prvi član $\psi(r_p)$ opisue prostorne osobine čestice koja ima funkciju sličnu vodonikovoj, sa kvantnim brojevima n, l, m_l, a drugi član $\chi(p)$ bi moglo biti stanje spina sa kvantnim brojem $s = 1/2$ i $m_s = \pm 1/2$. Kada je to slučaj imamo jednočestično kvantno stanje u formi :

$$\Phi_{n,l,m_l,m_s}(p) = \psi_{n,l,m_l}(r_p)\chi_{s,m_s}(p)$$

Sada možemo napisati izraz za kvantno stanje koje opisuje prostorne i spin osobine dve identične čestice. Kada obe čestice zauzmu isto jednočestično stanje, recimo neko sa prostornim i spin kvantnim brojevima n, l, m_l, m_s možemo konstruisati simetrično stanje dve identične čestice u formi :

$$\Phi^{(S)}(p,q) = \Phi_{n,l,m_l,m_s}(p)\Phi_{n,l,m_l,m_s}(q) \quad (19.16)$$

Ali antisimetrično dvočestično stanje za dve identične čestice ne može biti konstruisano, kada obe čestice zauzimaju isto jednočestično stanje. Ovo implicira, da kada identične čestice imaju antisimetričnu razmenu simetrije, dve ili više čestica ne mogu imati isto jednočestično stanje. Kada su čestice povezane sa dva različita jednočestična stanja moguće je konstruisati i simetrično i antisimetrično dvočestično stanje. Na primer možemo imati simetrično stanje u formi :

$$\Phi^{(S)}(p,q) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Phi_{n,l,m_l,m_s}(p)\Phi_{n',l',m_l',m_s'}(q) + \Phi_{n,l,m_l,m_s}(q)\Phi_{n',l',m_l',m_s'}(p)\right] \quad (19.17)$$

, i asimetrično stanje u formi :

$$\Phi^{(A)}(p,q) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Phi_{n,l,m_l,m_s}(p)\Phi_{n',l',m_l',m_s'}(q) - \Phi_{n,l,m_l,m_s}(q)\Phi_{n',l',m_l',m_s'}(p)\right] \quad (19.18)$$

Alternativno, možemo konstruisati simetrična i antisimetrična dvočestična stanja kombinacijom dvočestičnih talasnih funkcija i dvočestičnog stanja spina sa odgovarajućom simetrijom.

Ilustrovaćemo ovu proceduru razmatrajući dve čestice sa polu-spinom. Stanje spina za dve čestice sa polu-spinom, može biti ozačeno sa kvantnim brojevima S i M_S, ukazujući da magnituda i z komponenta kombinovanog spin ugaonog impulsa ovog stanja su $\sqrt{S(S+1)}\hbar$ i $M_S\hbar$ respektivno. Već smo naišli ranije na pravila za sabiranje spinova, orbitalnog i spin ugaonog impulsa pojedinačne čestice. Pravila za sabiranje dva spina su veoma slična. U stvari, dva spina sa kvantnim brojevima $s = 1/2$ mogu se kombinovati tako da daju kombinovani spin sa vrenostima :

$$S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \;\; i \; S = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$$

Ovo pravilo je samo brz način da se kaže da dvospinsko stanje polu-spinova, $\chi_{\frac{1}{2},m_S}(p)$ i $\chi_{\frac{1}{2},m_S}(q)$ može da se kombinuje da daje dvočestično stanje spina sa kvantnim brojevima S=1 i S=0. Eksplicitno, ako koristimo jednostavniju notaciju u kojoj $\chi_{\frac{1}{2},m_S}$ označimo sa χ_+ kada je $m_s = 1/2$ i χ_- kada je $m_s = -1/2$, imamo tri simetrična stanja spina :

$$\chi_{1,+1}^{(S)}(p,q) = \chi_+(p)\chi_+(q)$$

$$\chi_{1,0}^{(S)}(p,q) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_+(p)\chi_-(q) + \chi_+(q)\chi_-(p)] \qquad (19.19)$$

$$\chi_{1,-1}^{(S)}(p,q) = \chi_-(p)\chi_-(q)$$

, koja odgovaraju za S=1, i $M_S = +1,0,-1$, i jedno antisimetrično stanje spina :

$$\chi_{0,0}^{(A)}(p,q) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_+(p)\chi_-(q) - \chi_+(q)\chi_-(p)] \qquad (19.20)$$

, što odgovara za S=0 i $M_S = 0$. Ova dvočestična stanja spina, mogu se kombinovati sa dvočestičnim talasnim funkcijama da proizvedu dvočestična kvantna stanja sa određenom razmenom simetrije. Na primer, možemo konstruisati antisimetrično kvantno stanje, za dva elektrona na dva različita načina. Možemo kombinovati simetrična stanja spina sa kvantnim brojevima S=1 i $M_S = +1,0,-1$ sa antisimetričnom talasnom funkcijom $\psi^{(A)}(r_p, r_q)$ što daje :

$$\Phi^{(A)}(p,q) = \psi^{(A)}(r_p, r_q)\chi_{S,M_S}^{(S)}(p,q) \qquad (19.21)$$

, ili možemo kombinovati antisimetrična stanja spina sa kvantnim brojevima S=0 i $M_S = 0$ i simetričnu talasnu funkciju $\psi^{(S)}(r_p, r_q)$ što daje :

$$\Phi^{(A)}(p,q) = \psi^{(S)}(r_p, r_q)\chi_{S,M_S}^{(A)}(p,q) \qquad (19.22)$$

Ovaj primer je izabran zbog toga, kako ćemo kasnije videti, što su kvantna stanja elektrona uvek antisimetrična.

BOZONI I FERMIONI

Prema argumentima prezentovanim u prethodnom delu, kvantno stanje koje opisuje prostorne i spin osobine identičnih čestica mora imati određenu razmenu simetrije i postoje dve moguće opcije za ovu simetriju : simetrija ili antisimetrija. Ali u stvarnom svetu identične čestice nemaju slobodu da biraju između ovih opcija. U realnom svetu postoji dva tipa kvantnih čestica koje zovemo bozoni i fermioni sa sledećim karakteristikama :

- Bozoni su čestice sa celobrojnim spinom, i sistem identičnih bozona mora imati kvantna stanja koja su simetrična kada se dve čestice zamene.
- Fermioni su čestice sa spinom koji je polovina celog broja i sistem identičnih fermiona mora imati kvantna stanja koja su antisimetrična kada se dve čestice zamene.

Ova iznenađujuća veza između razmene simetrije i spina identičnih čestica se zove spin-statistička teorema. Njene dalekosežne posledice za osobine materije su identifikovane u ranim danima kvantne

mehanike, a kasnije se pokazala i teorijske konsekvence na relativističku kvantnu teoriju polja. Pošto elektroni imaju polovični spin, oni se ne razlikuju na fermionski način. Oni nikada nemaju simetrična stanja kao u jednačini (19.17) već samo antisimetrična stanja prema jednačini (19.18). Ova antisimetrična stanja elektrona, su veoma značajna za naše razumevcanje sveta oko nas, pošto osobine atoma i materije su određene kvantnom mehanikom elektrona. Tri najvažnije konsekvence antisimetrije elektronskih kvantnih stanja su sledeće. Prvo, jednočestično stanje može biti zauzeto sa više elektrona, multielektronsko kvantno stanje može biti simetrično i antisimetrično kada se elektroni zamene. Ova karakteristika elektrona se zove Paulijev princip isključivosti. Paulijev princip igra odlučujuću ulogu u ispoljavanju fizičkh i hemijskih osobina elemenata što dovodi do razumevanja Periodnog sistema elemenata. On takođe igra ključnu ulogu u formiranju električnih i termalnih osobina elektrona i materije. Drugo, kada je spinski deo kvantnog stanja dva elektrona simetričan, prostorni deo tj. talasna funkcija je nužno antisimetrična. Kada je to slučaj, elektroni, slično kao dve identične čestice u harmonijskom potencijalnom oscilatoru imaju jaku tendenciju izbegavanja. Ova tendencija izbegavanja je isključivo odgovorna za čvrstoću materije. Čvrstoća je otpor kompresiji, a izbegavanje identičnih elektrona sprečava i atome da se približavaju i kompresuju. Treće, kada je stanje spina dvočestičnog sistema antisimetrično, talasna funkcija je nužno simetrična. U ovom slučaju, elektroni, slično identičnim česticama imaju tendenciju gomilanja. Kada se to dešava između susednih atoma, može da se kreira kovalentna veza pa se na taj način formiraju molekuli. Protoni i neutroni, slično elektronima su čestice sa spinom koji je polu ceo broj. Nemogućnost razlikovanja protona i neutrona ima odlučujuću ulogu u oblikovanju modela atomskog jezgra. U ovom modelu, protoni i neutroni zauzimaju jednočestična stanja, ali ova jednočestična stanja mogu biti zauzeta od više protona i neutrona. Na sličan način, teorijski modeli protona, neutrona i drugih hedrona, se rukovode idejom da kvarkovi speifičnih okusa i boja takođe deluju slično sistemu identičnih fermiona sa antisimetričnim kvantnim stanjima. Bozonski način nerazlikovanja takođe dovodi do važnih fizičkih fenomena. Pošto su bozoni opisani simetričnim kvantnim stanjima, mnogi bozoni mogu zauzeti isto jednočestično stanje i kada se ovo dešava nastaje kvantno-mehaničko ponašanje na makroskopskom nivou. Najvažniji primer bozonskog nagomilavanja je koherentna svetlost lasera. Ova koherencija nastaje pošto fotoni, bozoni sa spinom jedan, imaju veliku verovatnoću da poseduju istu energiju i impuls, na isti način kao što dve čestice sa simetričnim talasnim funkcijama imaju veliku verovatnoću da se nađu na istoj lokaciji. Bozonsko nagomilavanje je odgovorno za superfluidnost tečnog helijuma na temperaturama ispod 2.2 K. Tečni helijum je sistem slabog interagujućih atoma helijuma koji se ponašaju slično bozonima pošto se ti atomi sastoje od ^4He jezgara sa spinom nula i dva elektrona čiji kombinovani spin je takođe nula. Na niskim temperaturama, značajan deo atoma tečnog helijuma se "kondezuje" u isto najniže energetsko stanje. Oni formiraju Boze-Ajnštajnov kondezat, u kome atomi imaju funkcije koje su u konherenciji jedna s drugom, i kreću se kolektivno bez ometanja. Nedavno je skoro čist Boze-Ajnštajnov kondezat proizveden od hladnih atoma u magnetnoj klopci. Zaista, 2001. godine Nobelova nagrada za fiziku je dodeljena Eriku Kornelu, Volfangu Keterlu i Karlu Vimanu za proizvodnju skoro čistog Boze-Ajnštajnovog kondezata 1995. godine. Iznenađujuće je da se bozonoliko nagomilavanje takođe dešava u situacijama gde se očekuje fermionliko ponašanje. To se dešava u superprovodnim metalima na niskim temperaturama, pošto parovi elektrona deluju na sličan način kao neprepoznatljivi bozoni. Ovo se verovatno dešava kada tečni helijum-3 postaje supeprovodni fluid na jako niskim temperaturama. Helijum-3 atomi su za razliku od običnog helijuma fermioni, pošto ^3He jezgro ima spin ½, ali par helijum-

3 atoma može delovati na sličan način kao sistem neprepoznatljivih bozona i dovode do koektivnog kretanja bez ometanja u tečnom helijumu-3.

ATOMI

Jednom se Ričard Fejnman pitao, zašto hemičari imaju smešan sistem brojanja. Zaista, umesto 1,2,3,4 oni broje, vodonik, helijum, litijum, berilijum itd. Razlog je izuzetan. Atom sa Z elektrona je identičan svakom drugom atomu sa Z elektrona. Oni imaju istu veličinu, istu jonizacionu energiju, i istu tendenciju reagovanja i nereagovanja. Atomska istovetnost može biti označena jednim brojem, atomskim brojem Z, i postoji 100 ili nešto više različitih tipova. Štaviše, ova istovetnost je jako otporna. Kada je atom pobuđen zbog sudara sa fotonom, elektronom ili drugim atomom, uvek će se vratiti u originalno, prvobitno stanje. Ova istovetnost atoma se ne može razumeti kroz koncepte klasične fizike. To je osobina kvantnog stanja sa Z elektrona. Ova esencijalna karakteristika kvantnih stanja može se razumeti kombinacijom, na aproksimativan način, koncepta koji opisuje vodonikov atom i implikacijama koje proističu iz činjenice da su elektroni fermioni koji se ne razlikuju međusobno. Iako moramo da budemo zadovoljni približnom predstavom o kvantnim stanjima atoma sa atomskim brojem Z, ova stanja, u principu, daju kompletan opis koji je jedinstven za sve atome sa atomskim brojem Z.

Atom sa atomskim brojem Z, sastoji se od Z elektrona, koji se drže zajedno, u potencijalnom energetskom polju zahvaljujući Kulonovoj privlačnoj sili jezgra atoma i Kulonovoj odbojnoj sili svakog para elektrona. U helijumovom atomu na primer, dva elektrona se kreću u potencijalnom energetskom polju :

$$V(r_p, r_q) = -\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_p} - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_q} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |r_p - r_q|} \qquad (20.01)$$

, a energetski nivoi i svojstvene funkcije mogu se pronaći rešavanjem jednačine sopstvenih vrednosti :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}(\nabla_p^2 + \nabla_q^2) + V(r_p, r_q)\right]\psi(r_p, r_q) = E\psi(r_p, r_q) \quad (20.02)$$

Tačno rešenje ove jednačine se može naći, ali za atome sa više elektrona mora se koristiti metod baziran na metodi koja se zove aproksimacija centralnim poljem. Ovi metodi koje su prvi razvili E.Fermi, D.R.Harti i L.H. Tomas nas dovode do sledećeg kvalitativnog opisa atomskih kvantnih stanja.

APROKSIMACIJA CENTRALNIM POLJEM

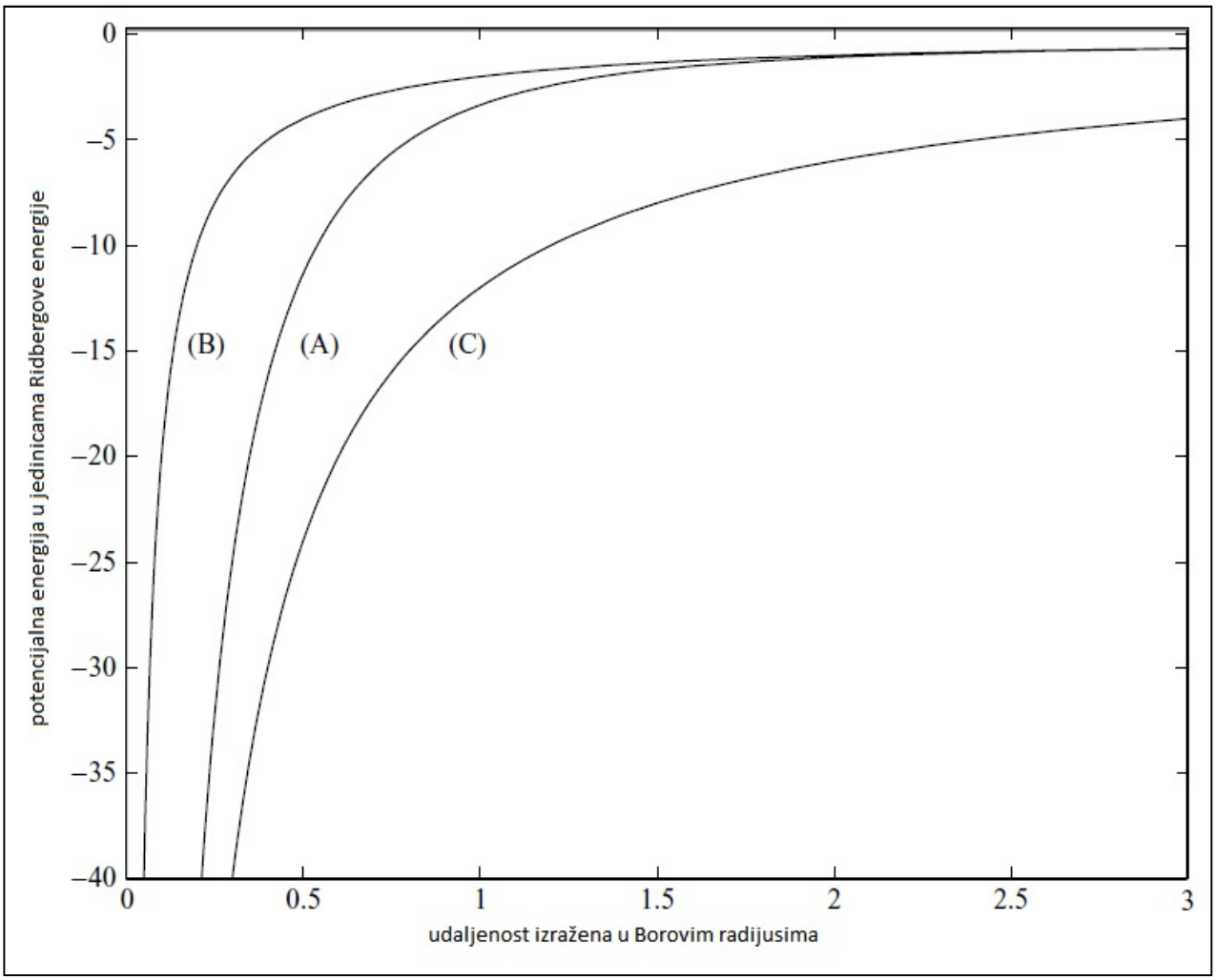
U ovom metodu svaki elektron u atomu se kreće nezavisno u centralnom potencijalnom polju zahvaljujući Kulonovoj privlačnoj sili jezgra i prosečnom efektu prisustva drugih elektrona u atomu. Ako elektron koga posmatramo ima koordinatu r_p, on će videti, kada je r_p veliko, jezgro naelektrisanja Ze, zaklonjeno unutrašnjim elektronima sa ukupnim naelektrisanjem $-(Z-1)e$ a očekivana potencijalna energija je obliku :

$$V_B(r_p) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_p} \quad (20.03)$$

Međutim, ako je r_p malo elektron vidi ogoljeno jezgro, a očekivana potencijalna energija je u obliku :

$$V_c(r_p) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_p} \quad (20.04)$$

Ova razmatranja impliciraju da gruba forma centralnog potencijalnog polja za svaki nezavisni elektron u atomu je slična krivoj (A) na slici 20.01.



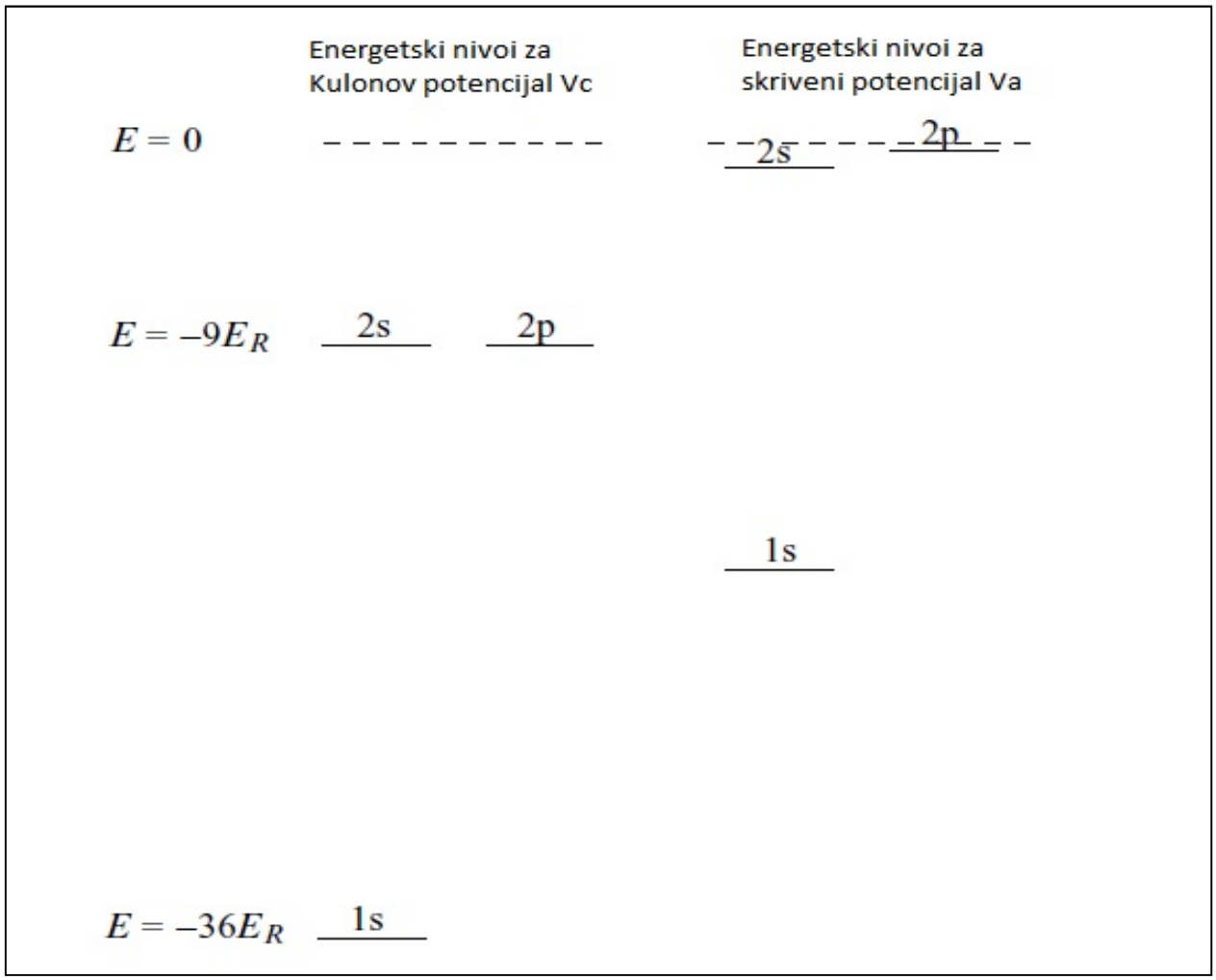
Slika 20.01 Jendostavan model potencijalnog energetskog polja u atomu ugljenika sa atomskim brojem Z=6.

Na većim distancama ovaj potencijal se približava Kulonovom potencijalu usled tačkastog naelektrisanja e, kriva (B), a na malim rastojanjima se približava Kulonovom potencijalu zbog tačkastog naelektrisanja Ze, kriva (C). Veoma pojednostavljen model za ovaj centralni potencijal je da preko jednačina :

$$V_A(r_p) = -\frac{z(r_p)e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_p}, gde\ je\ z(r_p) = (Z-1)e^{-r/a} + 1 \quad (20.5)$$

Ova jednačina sa a koje je jednako polovini Borovog radijusa i Z=6 se koristi da se izračuna oblik krive (A) na slici 20.01. Obzirom na centralni potencijal $V(r)$ mogu se naći nivoi energije i svojstvene funkcije za svaki elektron u atomu rešavanjem jednočestične jednačine svojstvenih vrednosti energije :

$$\left[-\frac{r^2}{2m_e}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(r) = E\psi(r) \quad (20.6)$$



Slika 20.02. Energije 1s,2s,2p orbitala u ugljenikovom atomu

Ova jednačina je identična sa jednačinom (18.5) koja nam je bila polazna tačka u određivanju stanja atoma vodonika. Ovo znači da svojstvene funkcije za ova jednočestična stanja mogu biti označena istim kvantnim brojevima korišćenim da se označe svojstvene funkcije vodonikovog atoma : n –osnovni kvantni broj, kvantni broj orbitalnog ugaonog impulsa l i m_l i kvantni broj spina elektrona m_s. Ali za razliku od vodonikovog atoma, energetski nivoi zavise od dva od ovih kvantnih brojeva, n i l . Energija ovih nivoa

može biti označena sa E_{nl}, ali mi ćemo koristiti spektroskopsku notaciju $1s, 2s, 2p$ itd. Takođe ćemo pratiti konvencije atomske fizike koja upućuje na ova jednočestična stanja kao orbitalna. Efekat zaklanjanja na energije u orbitama ugljenikovog atoma je ilustrovan slikom 20.02.

Energetski nivoi za $1s, 2s, 2p$ za nesakriveni potencijal $V_c(r)$, je prikazan sa leve strane, a za sakriveni potencijal $V_A(r)$ sa desne strane. Treba primetiti da za sakriveni potencijal, energija orbitala se povećava kada se osnovni kvantni broj povećava i da za datu vrednost n, se energija povećava kada kvantni broj orbitalnog ugaonog impulsa raste. Ovo povećanje sa porastom l se može razumeti prisećanjem da efektivni potencijal u radijalnoj Šredingerovoj jednačini uključuje centrifugalni potencijal $l(l+1)\hbar^2/2m_e r^2$. Pošto centrifugalni potencijal postaje sve odbojniji kako l raste, elektroni sa većim vrednostima l imaju nižu verovatnoću proboja u blizini jezgra i veću verovatnoću lociranja na većim distancama gde je jezgro sakriveno unutrašnjim elektronima. Neto efekat većeg l je slabija privlačna sila jezgra i veća energija. Svojstvene funkcije ovih orbitala može da se koristi da se konstruiše aproksimativno multi-elektronsko kvantno stanje, za atom u celini. Kao što smo diskutovali u prethodnom delu knjige, kvantna stanja koja opisuju elektrone koji se ne razlikuju moraju biti antisimetrična kad god se elektroni zamene. To je jedino moguće postići ako su elektroni povezani sa orbitalama u skladu sa Paulijevim principom isključivosti, tj. ne može više od jednog elektrona zauzeti orbitalu sa istim kvantnim brojevima n, l, m_l, m_s. Ovo znači da najviše dva elektrona mogu biti dodeljena 1s orbitali, jedan sa kvantnim brojevima $n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = 1/2$ i drugi sa kvantnim brojevima $n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = \pm 1/2$. Kada su $1s, 2s, 2p$ orbitale u potpunosti zauzete, dodatni elektroni se mogu samo povezati sa orbitalama sa osnovnim kvantnim brojem $n > 2$. Ove orbitale imaju veću energiju i takođe ograničen kapacitet. Možemo ilustrovati kako se koristi ovaj gradivni komplet za atomska stanja koja smo razmatrali u ugljenikovom atomu koji sadrži šest elektrona koji mogu zauzimati energetske nivoe slične onima prikazanim na slici 20.02. Osnovno stanje je dobijeno dodeljivanjem 6 elektrona orbitalama sa najnižim mogućim energijama, maksimum dva elektrona mogu imati energiju E_{1s}, maksimum dva energiju E_{2s}, a minimum energije za svaki od dva preostala elektrona je E_{2p}. Ovo pridruživanje daje konfiguraciju elektrona $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$ sa energijom :

$$E = 2E_{1s} + 2E_{2s} + 2E_{2p}$$

Prvo pobuđeno stanje ugljenikovog atoma se dobija pridruživanjem samo jednog elektrona 2s orbitali i tri elektrona 2p orbitali. Ovo dovodi do konfiguracije elektrona $(1s)^2(2s)(2p)^3$ sa energijom :

$$E = 2E_{1s} + E_{2s} + 3E_{2p}$$

Ako energetski nivoi prikazani na slici 20.02 za skriveni potencijal $V_A(r)$ se koriste kao vodič, energija osnovnog stanja je $-41.1E_R$, a energija prvog eksitovanog stanja je $-40.6E_R$. Jasno je, stanje visoke eksitacije (pobuđenosti) se može dobiti pridruživanjem više elektrona (2p) orbitalama ili povezivanjem elektrona sa 3s,3p,3d, ... orbitalama. U prethodnom pasusu smo možda dali materijala da se stvori pogrešan utisak da su elektroni u pojedinim orbitalama. To nije slučaj. Pošto se svi elektroni u atomu ne mogu razlikovati, svaki elektron je jednako povezan sa svakom zauzetom orbitalom. U stvari, slično dvo-elektronskom stanju, multi-elektronsko kvantno stanje je antisimetrično kada se bilo koja dva elektrona zamene. Takođe se možda stiče i utisak da je lako naći centralni potencijal atoma. U stvari, centralni

potencijal i svojstvena funkcija nezavisnih elektrona su kao pile i jaje. Ne zna se šta je prvo nastalo. Ovaj problem može biti rešen nizom kalkulacija u kojima centralni potencijal dovodi do svojstvene funkcije i verovatnoće elektrona što se onda može koristiti za poboljšanje aproksimacije centralnog potencijala. Na kraju se dobija centralni potencijal koji tačno opisuje nezavisne elektrone u atomu.

KOREKCIJE APROKSIMACIJE CENTRALNOG POLJA

Postoje dve važne korekcije aproksimacije centralnog polja. Prva se odnosi na preostalo elektron-elektron odbijanje koje nastaje zbog toga što Kulonova odbojna sila između elektrona u atomu ne može precizno opisati centralni potencijal. Druga je zbog spin-orbita interakcije. Ali pre nego što budemo mogli da razumemo ove korekcije, potrebno je da razvijemo precizniji opis kvantnog stanja atoma koji uzima u obzir kako se ugaoni impulsi elektrona u atomu mogu kombinovati. Pošto ugaoni impuls elektrona ima notaciju koja nije familijarna trebalo bi da se podsetimo nekih osnovnih činjenica navodeći neke konvencije o ugaonom impulsu.

- Magnituda i z komponenta ugaonog impulsa mogu imati vrednosti
$$\sqrt{j(j+1)}\hbar \quad i \quad m_j\hbar$$
, gde je j kvantni broj koji može biti jednak 0, 1/2, 1, 3/2... a m_j je kvantni broj koji može imati vrednosti $j, j-1, \dots, -j$.
- Dva ugaona impulsa sa kvantnim brojevima j_1 i j_2 mogu se kombinovati da daju ugaoni impuls sa kvantnim brojem j koji može da uzme sledeće vrednosti :
$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$$
- U atomskoj fizici se koriste mala slova sa ugaone impulse pojedinačnih elektrona: l i m_l za orbitalni ugaoni impuls, s i m_s za spin ugaonog impulsa i j i m_j za kombinaciju ova dva. Ali za ugaone impulse dva ili više elektrona se koriste velika slova na sličan način kao i za pojedinačne elektrone.
- Spektroskopska notacija koristi slova s, p, d, f... da označi orbitalne ugaone impulse pojedinačnih elektrona sa $l = 0,1,2,3$. Velika slova se na isti način koriste da označe ugaone impulse dva ili više elektrona.

Sa ovom pripremom možemo da opišemo kako se mogu kombinovati ugaoni impulsi elektrona u atomu. Dva načina kombinovanja se koriste u atomskoj fizici. Oni se zovu L-S spoj (takođe ima naziv i Rasel-Sanders spoj) , i j-j spoj. U L-S spoju orbitalni ugaoni impulsi elektrona se spajaju da bi dali kombinovani orbitalni ugaoni umpuls opisan kvantnim brojem L, i spin ugaoni impuls elektrona se spaja da daje spin ugaoni impuls opisan kvantnim brojem S. Ovi kombinovani spin i ugaoni impulsi se kombinuju da daju ukupni ugaoni impuls opisan kvantnim brojem J. U j-j spoju, orbitalni i spin ugaoni impuls svakog elektrona se kombinuju da daju kombinovani ugaoni impuls opisan kvantnim brojem j. Kombinovani ugaoni impuls svakog elektrona se tada spaja da bi dao ukupni ugaoni impuls opisan kvantnim brojem J. Spoj L-S je mnogo češći kada je preostala elektron-elektron odbojnost veća od spin-orbita interakcije, dok je j-j spoj češći u obrnutoj situaciji. U stvari, j-j spoj se koristi za atome sa većim atomskim brojevima dok se L-S spoj koristi za atome sa manjim atomskim brojevima. Ovde ćemo ilustrovati osnovnu ideju razmatranjem kako L-S spoj može biti iskorišćen za opis ugljenikovog atoma. Fokusiraćemo se na niža kvantna stanja sa konfiguracijom elektrona $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$. Kao što smo ranije naglasili ova kvantna stanja moraju biti

antisimetrična kada se elektroni zamene. Dva elektrona na (1s) orbitali, koja nužni imaju simetričnu talasnu funkciju, su u antisimetričnom kvantnom stanju ako imaju antisimetrično stanje spina. Takvo stanje spina ima nula spin. Dakle, pored toga što je orbitalni ugaoni impuls nula, dva (1s) elektrona imaju kombinovani spin ugaoni impuls jednak nuli. Isti slučaj je i sa dva (2s) elektrona. Dva elektrona u (2p) orbitali, svaki sa kvantnim brojem orbitalnog ugaonog impulsa l, mogu imati kombinovani orbitalni ugaoni impuls sa kvantnim brojem L koji može uzeti vrednosti 2, 1, 0 i kombinovani spin ugaoni impuls sa kvantnim brojem S koji može uzeti vrednosti 1, 0. Kao što smo ranije pokazali stanje spina sa S=1 je simetrično dok je to stanje sa S=0 antisimetrično. Može se takođe pokazati da razmena simetrije talasnih funkcija orbitalnih ugaonih impulsa je simetrična za L=2 , antisimetrična za L=1 i simetrična za L=0. Dakle prihvatljivo kvantno stanje sa antisimetričnom razmenom simterije za dva (2p) elektrona jedino postoji ako kvantni brojevi spina i orbitalnog ugaonog impulsa S i L se nađu u jednoj od kombinacija :

$$(i)\ S = 1\,, L = 1 \quad (ii)\ S = 0, L = 2 \quad (iii)\ S = 0, L = 0$$

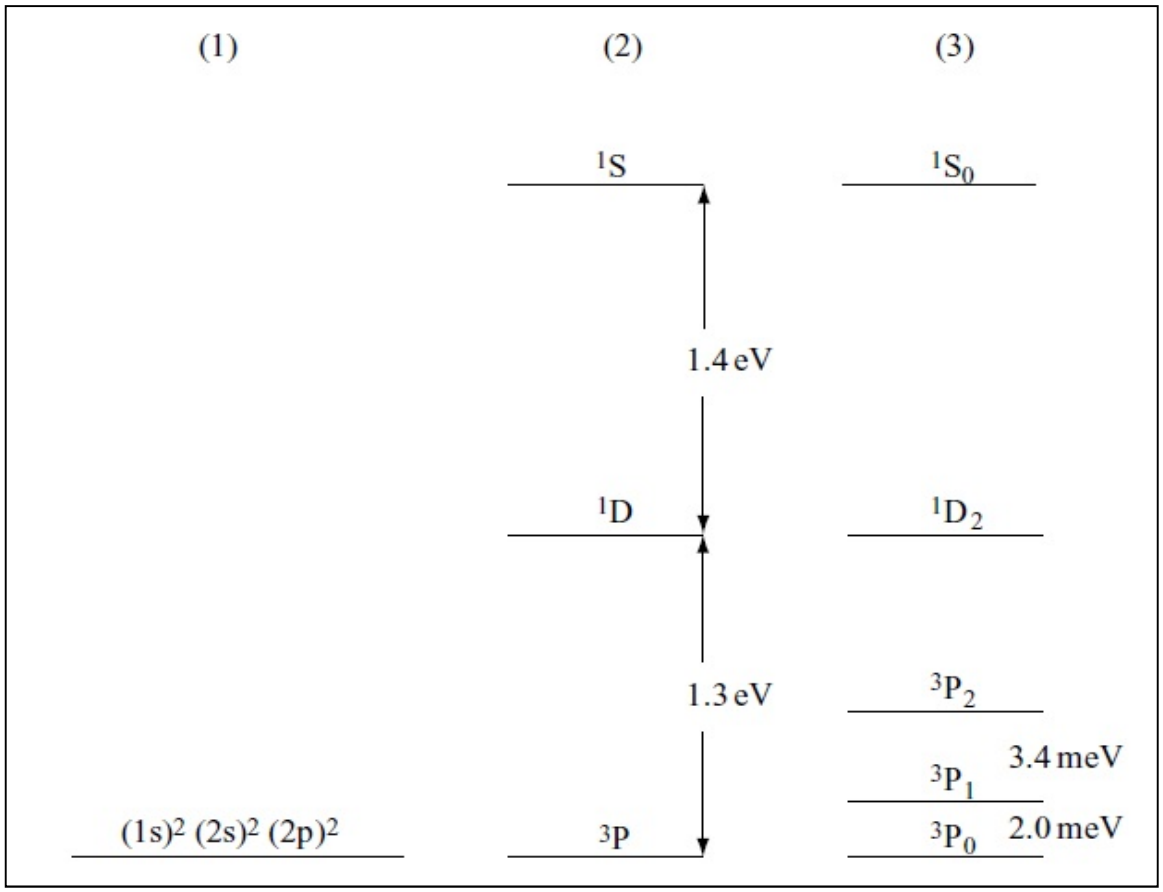
Ova stanja se često označavaju spektroskopskom notacijom ^3P, ^1D i ^1S, gde P označava L=1, D označava L=2 i S označava L=0, a superskript označava broj mogućih vrednosti z komponente spina, 2S+1. Pošto takođe postoji 2L+1 mogućih vrednosti za z komponentu orbitalnog ugaonog impulsa postoji $3 \times 3\ ^3P$ stanja, 1×5^1D stanja i 1×1^1S stanja, dajući ukupno 15 mogućih stanja sa kombinacijom elektrona $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$. Ako su svi elektroni u atomu stvarno preseljeni u centralni potencijal svih 15 stanja bi moglo imati istu energiju :

$$E = 2E_{1s} + 2E_{2s} + 2E_{2p}$$

Ali ova degeneracija se ne dešava zbog toga što nisu svi efekti elektron-elektron odbijanja uključeni u centralni potencijal. Postoji preostalo elektron-elektron odbijanje koje izaziva kvantna stanja ^3P, ^1D i ^1S da imaju različite energetske nivoe kao na slici 20.03. Ove energetske razlike nastale zbog efekta preostalog elektron-elektron odbijanja su različite u talasnim funkcijama sa različitom razmenom simetrije i različitim orbitalnim ugaonim impulsom. Pored zaostalog elektron-elektron odbijanja i spin-orbita interakcija takođe ima efekta na energetske nivoe atoma. To dovodi do fine strukture u kojoj energija zavisi, ne samo od konfiguracije i od vrednosti L i S, već i od vrednosti kvantnog broja ukupnog ugaonog impulsa J, koji može uzeti vrednosti :

$$J = L + S\,, \qquad J = |L - S|$$

Na primer, ako posmatramo ^3P stanje ugljenikovog atoma možemo upariti orbitalni i spin ugaoni impuls sa L=1 i S=1, da daju stanje sa ukupnim ugaonim impulsom J jednako 2, 1 ili 0 . Ova stanja se često označavaju sa $^3P_2$, $^3P_1$ i $^3P_0$, gde subskript označava vrednost kvantnog broja J i oni imaju neznatno različite energije što je ilustrovano sa desne strane slike 20.03. Energetski nivoi ^1D i ^1S stanja nisu podeljeni preko spin-orbita interakcije, pošto je samo jedna vrednost J moguća za ova stanja, J=2 i J=0, respektivno. Da sumiramo, diskutovali smo o tome kako atomi ugljenika mogu biti opisani sa većom preciznošću. U prvoj aproksimaciji energija nivoa je određena preko konfiguracije elektrona koja opisuje nezavisne elektrone u centralnom potencijalnom polju koje reprezentuje Kulonovo privlačenje jezgra i prosečan efekat odbijanja elektrona u atomu.



Slika 20.03. Tri aproksimacije za niže nivoe ugljenikovog atoma. 1. Jedinstveni nivo dat konfiguracijom elektrona $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$, 2. Tri nivoa podeljena zaostalim elektron-elektron odbijanjem 3. Pet nivoa zavisnih od spin-orbita interakcije

U drugoj aproksimaciji energija postaje zavisna od preostalog elektron-elektron odbijanja i nivoi se označavaju sa kvantnim brojevima orbitala i spina , L i S. U trećoj aproksimaciji nivoi zavise i od spin-orbita interakcije.

Na krjau napomenimo da većina našeg znanja o energetskim nivoima je izvedena iz spektralnih linija koje nastaju kada se dešavaju radijativni prelazi između energetskih nivoa. Najverovatnija tranzicija za emisiju ili apsorpciju u vidljivom i ultraljubičastom opsegu spektra je tranzicija električnog dipola, koju smo opisali u diskusiji o atomu vodonika. Za atome kompleksnije od vodonikovog atoma, selekciona pravila za tranziciju električnog dipola se komplikuju kada je $\Delta l = \pm 1$. Promena u ukupnom kvantnom broju ugaonog impulsa, $\Delta J = J_f - J_i$ pokorava se pravilu :

$$\Delta J = 0, \pm 1 \ , \qquad \text{ali} \ \ J_i = 0 \rightarrow J_f = 0 \text{ je striktno zabranjeno} \quad (20.7)$$

Kada L-S spoj pruža tačan opis kvantnog stanja sledeća pravila se takođe moraju poštovati :

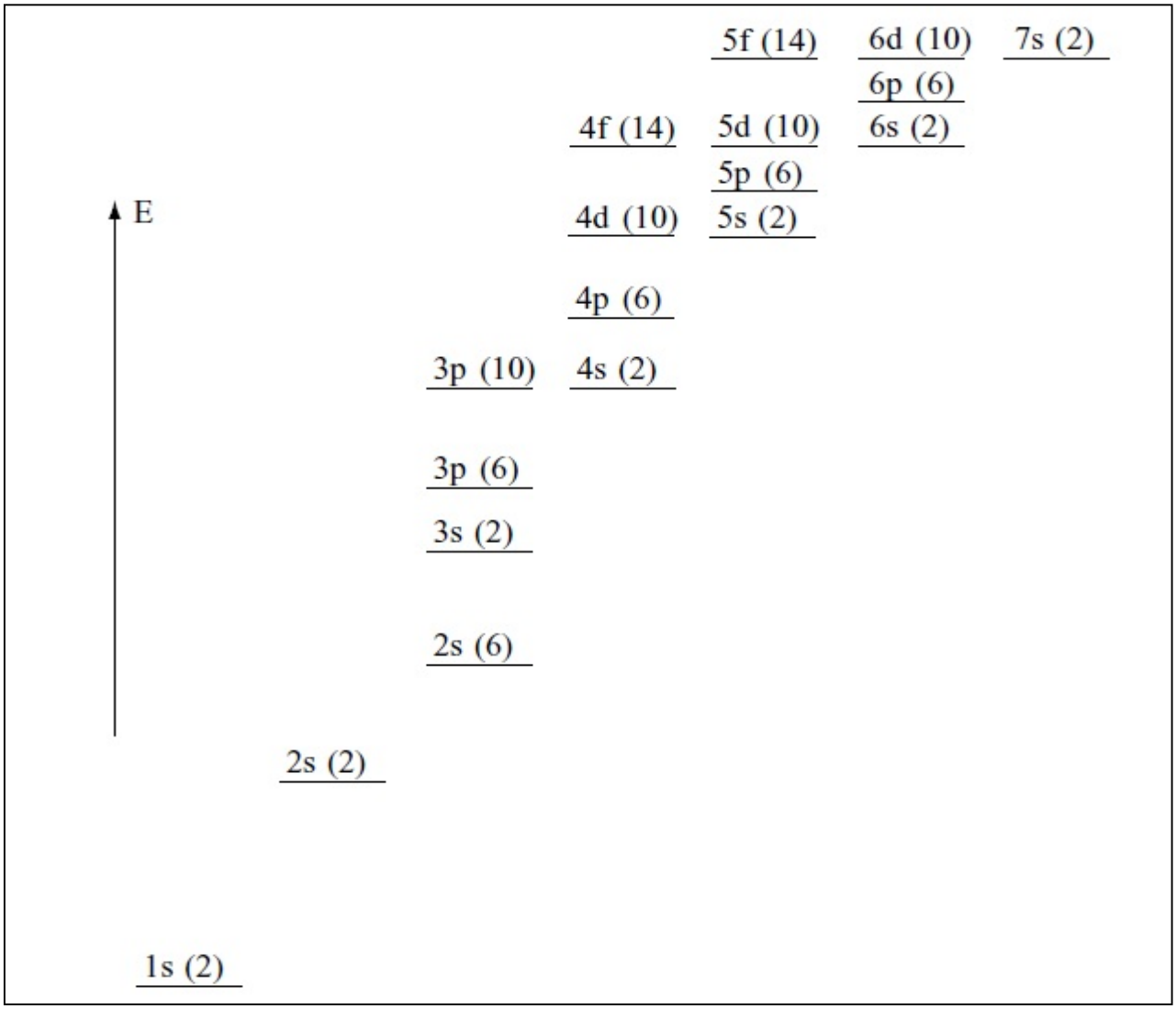
$$\Delta L = 0, \pm 1 \quad i \quad \Delta S = 0 \qquad (20.8)$$

Postoji i dodatno selekciono pravilo : Paritet atomskog stanja se mora promeniti tranzicijom električnog dipola. Paritet je određen ponašanjem kvantnog stanja kada se sve koordinate preslikaju preko koordinatnog početka. Ako je stanje nepromenjeno ono ima parni paritet a u suprotnom slučaju neparan paritet. Kao što je ranije navedeno paritet jedno-elektronskog stanja je paran kada je kvantni broj orbitalnog ugaonog impulsa paran i neparan u suprotnom slučaju. U opštem slučaju, ako stanje atoma ima konfiguraciju $(n_1 l_1)(n_2 l_2) \dots (n_Z l_Z)$, njegov paritet je paran ako je suma kvantnih brojeva orbitalnog impulsa $l_1 + l_2 + \cdots + l_Z$ parna i neparan ako je ova suma neparna.

PERIODNI SISTEM ELEMENATA

Atomi sa različitim atomskim brojevima Z imaju različite hemijske osobine, ali ove osobine variraju periodično sa Z. Na primer, litijum, kalijum, natrijum i rubidijum sa Z=3,11,19 i 37 se zovu alkalni metali pošto imaj slične osobine metala. Fluor, hlor i brom sa Z=9,17 i 35 respektivno, se zovu halogeni pošto imaju slične reaktivne osobine. Helijum, neon, argon i kripton sa Z=2, 10, 18, 36 se zovu plemeniti gasovi pošto imaju malu tendenciju za rekacijom. U stvari svaki hemijski element pripada grupi elemenata sa sličnim osobinama i svaka od ovih grupa sadrži elemente sa jasno definisanom sekvencom atomskih brojeva. Kvantna mehanika obezbeđuje fizička objašnjenja zašto osobine hemijskih elemenata variraju periodično. Samo dve kvantno mehaničke ideje su uključene. Prva je da svaki elektron u atomu zauzima jednočestično stanje ili orbital, određene energije. Druga je da elektroni zauzimaju ova stanja u skladu sa Paulijevim principom isključivosti. Orbitali koje zauzimaju elektroni u atomu, imaju energetske nivoe koji zavise od vrednosti atomskog broja Z; sa manjim varijacijama za atome sa atomskm brojevima većim od 20, sekvenca energetskih nivoa je ista za svaki atom. Ova sekvenca je prikazana na slici 20.04. Treba napomenuti da kao na slici 20.02. energija orbitala raste kada osnovni kvantni broj n raste, i da za datu vrednost n energija raste kada kvantni broj orbitalnog ugaonog impulsa raste. Važna kosekvenca rasta energije sa l je da orbitale različitih vednosti n mogu biti bliske. Konkretno, 3d i 4s nivoi energije su bliski, 4d i 5s takođe kao i 4f, 5d i 6s. Imajući u vidu niz energetskih nivoa prikazanih na slici 20.04. i ograničenje nametnuto Paulijevim principom isključivosti, možemo napisati konfiguraciju elektrona za svaki hemijski element. Za niže energetske nivoe prvih 30 hemijskih elemenata, konfiguracija elektrona je data u tabeli 20.01, zajedno sa njihovim jonizacionim energijama. Ove tabele pokazuju kako u atomima sa mnogo elektrona, u njihovim osnovnim stanjima, postoji specifičan set zauzetih orbitala. Pošto orbitale sa većim energijama imaju značajno prostorno izduženje, atomi imaju nekoliko ljuski naelektrisanja. Na primer, atom argona, za Z=18, ima K ljusku formiranu zauzimanjem 1s orbitale, L ljuska se formira zauzimanjem 2s i 2p orbitala, a M ljuska se formira zauzimanjem 3s i sp orbitala. Kako se pomeramo kroz tabelu na dole, periodično nailazimo na atome sa zajedničkim osobinama njihovih najslabije vezanih elektrona. Ono što je najvažnije, srećemo na, Z=2,10,18 , helijum, neon i argon, sa popunjenom ljuskom. To su vrlo tesno vezani sistemi malih veličina i visokh energija jonizacije. Oni se veoma teško pobuđuju, minimalna eksitaciona energija za helijum je 20 eV, 16 eV za neon i 10 eV za argon. Ovi atomi su hemijski skoro inertni. Na Z=3,11,19 nailazimo na litijum, natrijum, kalijum, koji imaju atome sa ispunjenim ljuskama i jedan slabo vezan elektron. Ovi atomi se zovu alkalni metali i lako interaguju sa drugim atomima prenoseći im slabo vezani elektron ili valentni elektron. Za Z=9 i 17 nailazimo na fluor i hlor kojima je potreban jedan elektron da formiraju ispunjenu ljusku. Ovi atomi imaju visoku jonizacionu energiju ali su reaktivni pošto je akvizicija

elektrona energetski povoljna, energija oslobođena vezivanjem elektrona, elektronski afinitet je 3.5 eV za fluor i 3.6 eV za hlor.



Slika 20.04. Šematska predstava sekvence energetskih nivoa elektronskih orbitala u atomu.

Napomenimo na kraju da periodičnost u periodnom sistemu elemenata postaje ponekad neregularna za atome sa većim atomskim brojevima. Ovo ponašanje se počinje ispoljavati za Z=19, pošto 3d i 4s energetski nivoi su veoma bliski jedan drugom za neke vrednosti Z, 3d je veći od 4s za neke Z a opet za neke druge nije, kao što se to vidi iz tabele 20.01 za atome kalijuma i cinka.

Element	Oznaka	Z	Konfiguracija elektrona	E_I eV
Vodonik	H	1	(1s)	13.6
Helijum	He	2	$(1s)^2$	24.6
Litijum	Li	3	$(1s)^2(2s)$	5.4
Berilijum	Be	4	$(1s)^2(2s)^2$	9.3
Bor	B	5	$(1s)^2(2s)^2(2p)$	8.3
Ugljenik	C	6	$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$	11.3
Azot	N	7	$(1s)^2(2s)^2(2p)^3$	14.5
Kiseonik	O	8	$(1s)^2(2s)^2(2p)^4$	13.6
Fluor	F	9	$(1s)^2(2s)^2(2p)^5$	17.4
Neon	Ne	10	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6$	21.6
Natrijum	Na	11	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)$	5.1
Magnezijum	Mg	12	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2$	7.6
Aluminijum	Al	13	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)$	6
Silicijum	Si	14	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^2$	8.1
Fosfor	P	15	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^3$	10.5
Sumpor	S	16	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^4$	10.4
Hlor	Cl	17	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^5$	13
Argon	Ar	18	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6$	15.8
Kalijum	K	19	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(4s)$	4.3
Kalcijum	Ca	20	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(4s)^2$	6.1
Skandijum	Sc	21	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)(4s)^2$	6.5
Titanijum	Ti	22	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^2(4s)^2$	6.8
Vanadijum	Va	23	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^3(4s)^2$	6.7
Hrom	Cr	24	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^5(4s)$	6.8

Mangan	Mn	25	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^5(4s)^2$	7.4
Gvožđe	Fe	26	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^6(4s)^2$	7.9
Kobalt	Co	27	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^7(4s)^2$	7.9
Nikl	Ni	28	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^8(4s)^2$	7.6
Bakar	Cu	29	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^{10}(4s)$	7.7
Cink	Zn	30	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^{10}(4s)^2$	6.7

Tabela 20.01. Konfiguracija elektrona i jonizaciona energija prvih 30 elemenata periodnog sistema