Задаци из квантне механике

Марко Миливојевић

Универзитет у Београду

Физички факултет

Октобар, 2016

ПРЕДГОВОР

Ова скрипта је намењена студентима Б смера Физичког Факултета у Београду који похађају курс Квантна механика 1 и 2. У њој су сакупљени и решени сви задаци рађени на вежбама 2012/2013 године, са још пар нерешених задатака из скоро сваке области који су предвиђени за самосталан рад. Такође, у Глави 3 се налазе задаци са рокова који су добар материјал за припрему испита. У уџбенику проф. Дамњановића се налазе само задаци важни за развијање теорије, док су ови задаци друге намене: употпуњавање знања и овладавање основним квантно механичким техникама. Како обрађује исте теме као и теорија и на тај начин прати професорова предавања, ову скрипту можете сматрати саставним материјалом дотичних курсева.

5.6.2013, М.М.

У односу на претходну верзију скрипта је мало преуређена. У глави 1 се сада налазе све теме које ће бити обрађене у летњем и зимском семестру. У глави 2 се налазе задаци са претходних рокова који нису решени и требало би да служе као материјал за припрему испита. У глави 3 су детаљно решени задаци из прве главе, осим пар који се препоручују за самосталан рад. Све примедбе и сугестије слати на *milivojevic@rcub.bg.ac.rs*

26.10.2015, М.М.

Форма скрипте се није променила у однос на претходну годину. Додат је одређен број нових задатака у главама 1 и 2, као и додатак А у којем се налази списак дозволених формула на писменом делу испиту.

20.10.2016, М.М.

Садржај

Предговор **1**

1 Задаци **1**

1.1 Уводни задаци из вероватноће . . . 1
1.2 Оператори . . . 1
1.3 Релације неодређености . . . 3
1.4 Динамика . . . 4
1.5 Линеарни хармонијски осцилатор . . . 5
1.6 Угаони момент . . . 5
1.7 Спин . . . 6
1.8 Честица у сферно симетричном потенцијалу . . . 6
1.9 Честица у електромагнетном пољу . . . 8
1.10 Слагање угаоних момената . . . 8
1.11 Идентичне честице . . . 9
1.12 Приближне методе . . . 10

2 Задаци са претходних рокова **13**

3 Решења **28**

3.1 Уводни задаци из вероватноће . . . 28
3.2 Оператори . . . 31
3.3 Релације неодређености . . . 45
3.4 Динамика . . . 49
3.5 Линеарни хармонијски осцилатор . . . 64
3.6 Угаони момент . . . 73
3.7 Спин . . . 83
3.8 Честица у сферно симетричном потенцијалу . . . 87
3.9 Честица у електромагнетном пољу . . . 94
3.10 Слагање угаоних момената . . . 102
3.11 Идентичне честице . . . 120
3.12 Приближне методе . . . 135

А Дозвољене формуле на испиту **159**

Б Квази дегенерисана теорија пертурбације **162**

Ц Еренфестов теорем **166**
Ц.1 Извођење у Шредингеровој слици 166
Ц.1.1 Честица масе m која се креће у потенцијалу 167
Ц.2 Извођење у Хајзенберговој слици 167

Литература **168**

Глава 1

Задаци

1.1 Уводни задаци из вероватноће

1. Наћи очекивану вредност случајне величине: 'број' који је изашао при бацању коцке.

2. Показати да је очекивана вредност дискретне случајне величине мања од највеће и већа од најмање вредности те случајне величине.

3. Показати да је квадрат дисперзије збира независних случајних величина једнак збиру квадрата дисперзија ових величина.

4. Апарат се састоји од 10 делова. Вероватноћа да неки део апарата откаже је $p = 0.1$. Израчунати очекивану вредност броја експеримената у којима ће отказати 5 делова ако се апарат укључује 100 пута.

5. Континуалној случајној величини x задата је густина вероватноће $f(x) = a$, $x \in (0, 100)$. Израчунати вероватноћу да $x \in (0, 5)$ и $\langle x \rangle$.

6. Континуалној случајној величини x задата је густина вероватноће $f(x) = Ae^{-ax}$, $x \in (0, \infty)$. Израчунати вероватноћу да $x \in (5, 10)$ и $\langle x \rangle$.

7. За Гаусову густину вероватноће $f(x) = Ae^{-bx^2}$, $x \in (-\infty, \infty)$ наћи $\langle x \rangle$ и Δx.

8. За Гаусову густину вероватноће $f(x) = Ae^{-bx^2 - cx}$, $x \in (-\infty, \infty)$ наћи $\langle x \rangle$ и Δx.

1.2 Оператори

1. Написати комутатор $[AB, C]$ помоћу комутатора $[A, C]$ и $[B, C]$.

2. Написати комутатор $[A, BC]$ помоћу комутатора $[A, B]$ и $[A, C]$.

3. Доказати Јакобијев идентитет $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$.

4. Доказати да ако оператори A и B комутирају важи $[A^m, B] = 0$.

5. Показати да за свака два оператора A и B који задовољавају $[[A,B],A]=0$ важи $[A^m,B]=mA^{m-1}[A,B]$.

6. Ако је $[A,B]=i$ наћи чему је једнак комутатор $[A,Ae^{iB}]$.

7. Наћи општи облик оператора $e^{i\pi A}$, где је $A^2=I$.

8. Извод оператора $A(\lambda)$ који експлицитно зависи од параметра λ се дефинише као

$$\frac{dA(\lambda)}{d\lambda}=\lim_{\epsilon\to 0}\frac{A(\lambda+\epsilon)-A(\lambda)}{\epsilon}.$$

Показати да важи

$$\frac{d}{d\lambda}(AB)=\frac{dA}{d\lambda}B+A\frac{dB}{d\lambda} \text{ и } \frac{d}{d\lambda}(A^{-1})=-A^{-1}\frac{dA}{d\lambda}A^{-1}.$$

9. Показати да за свака два оператора A и B важи ($Baker\,Campbell\,Hausdorff$ формула)

$$e^BAe^{-B}=A+[B,A]+\frac{1}{2!}[B,[B,A]]+\frac{1}{3!}[B,[B,[B,A]]]+\ldots.$$

10. Показати да је $[A,e^H]=\int_0^1 e^{\lambda H}[A,H]e^{(1-\lambda)H}d\lambda$.

11. Показати да је $[A^m,B]=\sum_{s=0}^{m-1}A^s[A,B]A^{m-s-1}$.

12. Показати једнакост $e^Ae^B=e^{A+B+\frac{[A,B]}{2}}$ ако важи $[A,[A,B]]=0=[[A,B],B]$.

13. Показати да је диференцијабилни оператор $p=-i\hbar\frac{d}{dx}$ линеаран и хермитски у простору диференцијабилних функција који су нула ван интервала (a,b) са скаларним производом $(\chi,\varphi)=\int_a^b\chi^*\varphi dx$.

14. Решити заједнички својствени проблем оператора A и B

$$A=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}3&1&0\\1&3&0\\0&0&4\end{pmatrix},\quad B=\frac{1}{3}\begin{pmatrix}4&1&-1\\1&4&-1\\-1&-1&4\end{pmatrix}.$$

15. Нека су $|u\rangle$ и $|v\rangle$ два вектора коначне норме. Показати да важи $Tr(|u\rangle\langle v|)=\langle v|u\rangle$.

16. За сваки линеарни оператор A показати да важи да су $AA^\dagger$ и $A^\dagger A$ хермитски оператори чији су трагови једнаки суми квадрата модула матричних елемената оператора $A^\dagger$ и A, редом. Показати је $Tr(A^\dagger A)=0=Tr(AA^\dagger)$ акко $A=0$.

17. Какви су бројеви $\langle m|A|n\rangle$ ако је $|n\rangle$ својствени базис оператора A који је:
а) *хермитски*, б) *унитаран*, в) *пројектор*.

18. Нека је $trA = \sum_n \langle n|A|n\rangle$. Показати да важе релације

$$tr(A+B) = trA + trB, \text{ и } tr(AB) = tr(BA),$$

у случају када су ови изрази добро дефинисани.

19. Показати да је $detA = e^{tr \ln A}$.

20. Показати да оператори $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}p)$ и њему адјунговани $a^\dagger$ задовољавају релацију $[a, a^\dagger] = 1$. Израчунати $[N, a]$ и $[N, a^\dagger]$. Показати даље да је хамилтонијан хармонијског осцилатора $H = \frac{1}{2}\hbar\omega(aa^\dagger + a^\dagger a) = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})$, за $N = a^\dagger a$.

21. Оператори x и p имају генералисане својствене векторе $|x\rangle$ и $|p\rangle$: $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ и $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$, а $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$. Одредити дејство оператора $\hat{U}(a) = e^{-\frac{ia\hat{p}}{\hbar}}$ на генералисани вектор $|x\rangle$.

22. Одредити "матричне елементе" следећих израза:
а)$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle$, *б)*$\langle x|\hat{x}|\psi\rangle$, *в)*$\langle x|\hat{x}|x'\rangle$, *г)*$\langle x|\hat{p}|x'\rangle$, *д)*$\langle p|\hat{x}|p'\rangle$.

23. Одредити својствене функције оператора $\alpha\hat{p} + \beta\hat{x}$ у координатној репрезентацији.

24. Израчунати $\langle x|p\rangle$.

25. Ако је

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x) = \begin{cases} C \sin \alpha x, & \text{за } x \in [0, \frac{\pi}{\alpha}]; \\ 0, & \text{остало,} \end{cases} \tag{1.1}$$

израчунати $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$.

1.3 Релације неодређености

1. У стању описаном таласном функцијом $\psi(x) = Ce^{\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2}}$ где су p_0, x_0 и a реални параметри, наћи густину вероватноће таласне функције у x, као и неодређеност координате и импулса.

2. Таласна функција стања честице је $\psi(x) = Ce^{\frac{ip_0 x}{\hbar}}\varphi(x)$, где је $\varphi(x)$ реална функција реалне промењљиве која је нула на границама интервала. Показати да је p_0 средњи импулс честице посматраног стања.

3. Честица масе m креће се у пољу чији је потенцијал $U = \frac{kx^2}{2}$. Одредити минималну могућу вредност енергије ове честице.

4. Полазећи од релација неодређености одредити енергију везе електрона у основном стању као и равнотежно растојање електрона од језгра.

1.4 Динамика

1. Наћи струју вероватноће и једначину континуитета.

2. Одредити својствене енергије и својствене таласне функције слободне честице масе m у једно и у три димензије.

3. Решити Шредингерову једначину за слободну честицу масе m која се налази у потенцијалу
$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{за } x \in (0, a), \\ \infty, & \text{за } x \in (-\infty, 0) \cup (a, \infty), \end{cases}$$
који се назива бесконачно дубока потенцијална (БДП) јама ширине a.

4. Наћи таласну функцију у произвољном тренутку времена t, честице масе m који се налази у БДП јами ширине a и у почетном тренутку се налазила у стању
$$\psi(x) = \begin{cases} Ax(a-x), & \text{за } x \in (0, a), \\ 0, & \text{за } x \in (-\infty, 0) \cup (a, \infty). \end{cases}$$

5. Наћи даљу еволуцију стања система који се налази у БДП јами ширине a ако је $\psi(x, 0) = A \sin^3 \frac{\pi x}{a}$.

6. Показати да решења једнодимензионалне Шредингерове једначине имају непрекидне прве изводе у тачкама коначног скока потенцијала и прекиде у тачкама бесконачног скока.

7. Показати да су везани енергетски нивои у једнодимензионалним потенцијалима недегенерисани, тј. да сваком (дискретном) енергетском нивоу одговара тачно једна својствне функција.

8. Показати да су везана стања 1Д Шредингерове једначине парне или непарне функције у случају када је потенцијал парна функција координате x.

9. Наћи коефицијент рефлексије и трансмисије за честицу масе m и енергије $E > V$ која са лева наилази на баријеру
$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{за } x < 0, \\ V, & \text{за } x > 0. \end{cases}$$

10. Одредити енергетске нивое и таласне функције за честицу масе m која наилази са лева на потенцијалну баријеру $V(x) = -\alpha\delta(x)$, $\alpha > 0$.

11. Решити Шредингерову једначину за честицу масе m која са лева наилази на баријеру
$$V(x) = \begin{cases} -V, & \text{за } x \in (-a, a), \\ 0, & \text{за } x \in (-\infty, -a) \cup (a, \infty). \end{cases}$$

12. Одредити операторе координате и импулса за слободну честицу у Хајзенберговој слици.

13. Написати стационарну Шредингерову једначину у импулсној репрезентацији за честицу масе m и енергије E која се налази у спољашњем пољу $V(x)$.

1.5 Линеарни хармонијски осцилатор

1. Одредити својствене функције хамилтонијана линеарног хармонијског осцилатора.

2. Одредити неодређеност линеарног хармонијског осцилатора у n-том својственом стању.

3. У својственом базису ЛХО наћи операторе $\hat{H}$, $\hat{p}$ и $\hat{x}$.

4. Линеарни хармонијски осцилатор налази се у стању $|\psi\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{2}}{4}|2\rangle + c|3\rangle$. Наћи реалну константу c а потом одредити $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}$ у стању $|\psi\rangle$.

5. Линеарни хармонијски осцилатор налази се у стању $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|3\rangle - \frac{i}{\sqrt{3}}|5\rangle + c|10\rangle$. Наћи реалну константу c а потом одредити $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}$ у стању $|\psi\rangle$.

6. Одредити операторе координате и импулса линеарног хармонијског осцилатора у Хајзенберговој слици. Израчунати комутаторе $[x_H(t_1), p_H(t_2)]$ и $[x_H(t_1), x_H(t_2)]$.

7. Одредити својствене енергије линеарног хармонијског осцилатора у импулсној репрезентацији.

1.6 Угаони момент

1. Одредити заједнички својствени базис оператора $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$.

2. Ако дефинишемо операторе $\hat{L}_+$ и $\hat{L}_-$ као $\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$ и $\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$, показати:

   а)Оператори $\hat{L}_-\hat{L}_+, \hat{L}_+\hat{L}_-, \hat{L}_z$ међусобно комутирају.

   б)$\hat{L}_\pm|l,m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}|l,m\pm 1\rangle$.

3. Ако је дат сферни хармоник $Y_1^0(\cos\theta) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta$ помоћу оператора $\hat{L}_+$ и $\hat{L}_-$ у $|\theta,\varphi\rangle$ репрезентацији, одредити остале сферне хармонике.

4. Систем се налази у стању $|l,m\rangle$. Одредити очекиване вредности:

   а)$\langle\hat{L}_x\rangle$,

   б)$\langle\hat{L}_x^2\rangle$,

   в)$\langle\hat{L}_x\hat{L}_y\rangle$,

   г)$\langle\hat{L}_{\boldsymbol{n}}\rangle$,

   д)$\Delta\hat{L}_{\boldsymbol{n}}$.

5. а) Наћи матричне елементе оператора $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ у базису $(|l, m\rangle, m = -l, ..., l)$ за $l = 1$.

   б) Одредити очекивану вредност оператора $\hat{L}_x^2$ који се налази у стању $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1, -1\rangle$.

6. а) Наћи матричне елементе оператора $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ у базису $(|l, m\rangle, m = -l, ..., l)$ за $l = 2$.

   б) У стању $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|2, 2\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}|2, 0\rangle + \frac{i}{\sqrt{3}}|2, -1\rangle$ наћи очекивану вредност $\langle \hat{L}_x^2 \rangle$.

7. Решити својствени проблем оператора $\hat{L}_x$ у базису $(|l, m\rangle, m = -l, ..., l)$ за $l = 1$.

8. Честица момента импулса $L = 1$ налази се у стању $|\psi\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}|1, 1\rangle + \frac{1}{2}|1, -1\rangle$ у базису $(|l, m\rangle, m = -l, ..., l)$. Одредити вероватноћу прелаза честице у стање које је својствено оператору $\hat{L}_x$ за својствену вредност $-\hbar$.

9. Одредити својствене функције и својствене вредности крутог ротатора у равни.

10. Наћи еволуцију крутог ротатора у равни, момента инерције I, који се у почетном тренутку налазио у стању $\psi(\varphi, t = 0) = Acos^3\varphi$.

1.7 Спин

1. Одредити репрезентацију оператора $\hat{S}_x$,$\hat{S}_y$, $\hat{S}_z$ у базису $|s, m_s\rangle$ за спин

   а) $s = 1/2$

   б) $s = 1$.

2. Одредити својствене вредности и својствене векторе оператора пројекције спина на произвољну осу $\boldsymbol{n}$ за $s = 1/2$.

3. Електрон се налази у спинском стању $|1/2, 1/2\rangle$. Наћи вероватноћу да пројекција спина на осу $\boldsymbol{n}$ има вредност $\pm 1/2$.

4. За спин $s = 1/2$ наћи репрезентацију ротација око $\boldsymbol{n}$ осе.

1.8 Честица у сферно симетричном потенцијалу

1. Разматрамо честицу масе m која се креће у сферно симетричном потенцијалу $U(r)$:

   а)Показати да су решења стационарне Шредингерове једначине облика $R(r)Y_l^m$, где је $R(r)$ функција која задовољава диференцијалну једначину

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR(r)}{dr}) + (U(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2})R(r) = ER(r)$$

а Y_l^m сферни хармоници.
б) Показати да из $[H, L^2] = 0$ можемо доћи до истог резултата.
ц) Упростити радијалну једначину сменом $R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$.
д) Испитати понашање радијалне функције у близини $r = 0$.

2. Наћи таласну функцију и енергију s стања честице која се налази у сферно симетричној потенцијалној јами полупречника a

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{за } r \in (0, a), \\ \infty & \text{за } r > a, \end{cases}$$

Решења тражити у облику $R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$.

3. Користећи резултате добијене у претходном задатку израчунати средње вредности $\langle r \rangle$ и $\langle r^2 \rangle$ за честицу у $n-$том s нивоу.

4. Честица масе m и енергије E налази се у сферно симетричној потенцијалној јами полупречника a

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{за } r \in (0, a), \\ V_0 & \text{за } r > a, \end{cases}$$

a)Ако је $V_0 > E$, решити стационарну Шредингерову једначину претпостављајући да решења зависе само од r тј. наћи s стања.

b)Дискутовати граничне услове за коначан и бесконачан скок потенцијала.

5. Израчунати енергетске нивое и својствене функције водониковог атома. Дискутовати дегенерацију ових нивоа.

6. Основно стање атома водоника је $\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$, где је a_0- Боров радијус.

Израчунати:

а)Највероватније растојање електрона од језгра.

б)$\langle \frac{1}{r} \rangle$.

в)$\langle \frac{1}{r^2} \rangle$

г)$\langle r^k \rangle$

д)$\langle p_x^2 \rangle$

ђ)$\langle U(r) \rangle$

е)$\langle T \rangle$.

7. Показати да се проблем кретања две интерагујуће честице масе m_1 и m_2 може редуковати на проблем кретања једне честице ефективне масе $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ која се креће у потенцијалу $V(r)$ међусобне интеракције те две честице.

1.9 Честица у електромагнетном пољу

1. Одредити оператор брзине $\boldsymbol{v}$ честице у магнетном пољу. Наћи комутаторе $[x_i, v_j]$ и $[v_i, v_j]$.

2. Показати да решења Шредингерове једначине у електромагнетном пољу задовољавају једначину континуитета. Како је у том случају дефинисања струја $\vec{j}$?

3. Показати да се хамилтонијан честице без спина масе m и наелектрисања e која се налази у константном магнетном пољу $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$, може написати у форми $H = H_0 + \frac{e^2B^2}{8mc^2}(x^2+y^2) - \frac{e}{2mc}Bl_z$, где је H_0 хамилтонијан слободне честице. Доказати да је својствена функција облика $e^{ikz}e^{i\lambda\varphi}\chi(\rho)$.

4. Одредити својствене функције и својствене енергије честице без спина која се креће у хомогеном магнетном пољу при следећим калибрационим условима векторског потенцијала:
   а) $\boldsymbol{A} = (0, Bx, 0)$
   б) $\boldsymbol{A} = (-By, 0, 0)$.

5. Одредити својствене енергије и својствене функције честице без спина која се налази у електричном и магнетном пољу ($\boldsymbol{E} \perp \boldsymbol{B}$).

6. На електрон делује потенцијал $\frac{1}{2}m\omega_0^2\rho^2$, где је m - маса електрона, ω_0 - фреквенца и ρ - поларна координата. Проблем је 2Д, електрон се налази у xy равни, и на њега делује константно магнетно поље $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$ (изабраћемо гејџ векторског потенцијала као $\boldsymbol{A} = (-\frac{1}{2}By, \frac{1}{2}Bx, 0)$). Раздвојити променљиве у Шредингеровој једначини и добити једначину која зависи од ρ и познатих параметара B, m и ω_0. Одредити својствене енергије и дискутовати енергетски спектар.

7. Испитати енергетске нивое атома водоника у присуству магнетног поља ако поље интерагује само са орбиталним магнетним моментом електрона $\boldsymbol{\mu_B}$.

8. Наћи својствене функције и својствене енергије неутрона ($e = 0, s = \frac{1}{2}$) спинског магнетног момента $\boldsymbol{\mu_s}$ у хомогеном магнетном пољу $\boldsymbol{B}$.

9. Одредити својствене енергије и својствене функције 3Д ХО ($U(r) = m\omega_0^2r^2/2$) који се налази у магнетном пољу усмереном дуж z-осе.

10. Честица се налази у својственом стању оператора $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}$ за својствену вредност $\hbar/2$. Уколико у тренутку $t = 0$ укључи магнетно поље B дуж z осе, одредити средње вредности оператора S_i $(i = x, y, z)$ у произвољном тренутку.

1.10 Слагање угаоних момената

1. За две честице спина $s = \frac{1}{2}$ одредити својствена стања и својствене вредности оператора $\boldsymbol{S}^2$ и S_z. $(\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2)$

2. Показати једнакост димензија

$$\dim\left(V^{(k_1\lambda_1)} \otimes V^{(k_2\lambda_2)}\right) = \dim \oplus_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} V^{(k\lambda_1\lambda_2)}.$$

3. Показати да у $V_{12}^{(s)}$ важи релација $\boldsymbol{S}^2 = \frac{\hbar^2}{2}(3 + \boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)$. Ако са $P^{(3)}$ и $P^{(1)}$ обележимо пројекторе на својствене потпросторе $V(s=1)$(триплетни простор), и $V(s=0)$(синглетни простор) од $\boldsymbol{S}^2$ у $V_{12}^{(s)}$, показати да важи $P^{(3)} = \frac{1}{2\hbar^2}\boldsymbol{S}^2$ и $P^{(1)} = 1 - \frac{1}{2\hbar^2}\boldsymbol{S}^2$.

4. Решити први задатак користећи општу теорију слагања угаоних момената.

5. Одредити стандардни базис у орбиталном простору стања две честице са вредностима орбиталних квантних бројева j_1 и j_2.

6. Наћи стандардни базис у орбиталном простору стања две честице чије су вредности орбиталних квантних бројева $j_1 = 1$ и $j_2 = 1$. Проверити резултат користећи таблицу CG-коефицијената.

7. Наћи стандардни базис у спинском простору стања три честице чије су вредности спинских квантних бројева $s_1 = 1/2$, $s_2 = 1/2$ и $s_3 = 1/2$.

8. Одредити стандардни базис атома водоника ψ_{nljm_j}.

9. Дефинисати скаларне и векторске операторе.

10. Доказати да је скаларни производ две векторске опсервабле, $\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{W} = V_x W_x + V_y W_y + V_z W_z$, скаларни оператор.

11. Доказати Вигнер Екартов теорем за векторске операторе.

12. Доказати пројекциони теорем.

13. Израчунати Ландеов g_j фактор атомског нивоа.

1.11 Идентичне честице

1. Разматрати систем две идентичне честице и за њега дефинисати:

   - Пермутациони оператор P_{21}.
   - Особине пермутационог оператора P_{21}.
   - Симетричне и антисиметричне векторе стања, као и симетризатор и антисиметризатор.
   - Трансформацију опесервабли под пермутацијама.

2. Разматрати систем који се састоји од више идентичних честица и за њега дефинисати:

- Пермутациони оператор.
- Особине пермутационог оператора.
- Тотално симетричан и тотално антисиметричан вектор стања, као и симетризатор и антисиметризатор.
- Трансформацију опсервабли под пермутацијама.

3. За две честице спина

   - $s = \frac{1}{2}$
   - $s = 1$

   одредити сва симетрична и антисиметрична стања у спинском простору. Какав је резултат за три честице?

4. Нека се два идентична фермиона налазе у

   - једнаким
   - различитим

   орбиталним стањима. Како изгледа укупна таласна функција та два фермиона? Урадити овај задатак и када уместо фермиона имамо бозоне.

5. Одредити основно стање система независних идентичних честица.

6. У систему два једнака бозона спина 0 једна честица се налази у орбиталном стању $|\psi\rangle$ а друга у стању $|\chi\rangle$; стања су нормирана и међусобно ортогонална. Колика је вероватноћа да се

   - 1 честица
   - 2 честице

   нађу у потпростору $z > 0$? Упоредити резултат са случајем различивих честицама; идентичних фермиона.

1.12 Приближне методе

1. Својствена стања Хамилтонијана H_0 су $|\varphi_1\rangle$ и $|\varphi_2\rangle$, са одговарајућим енергијама E_1 и E_2. У тренутку $t = 0$, на систем који се налазио у стању $|\varphi_1\rangle$ почне да делује пертурбација $W = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix}$.

   - Одредити нова својствена стања и својствене енергије.
   - Уколико је $W_{11} = W_{22} = 0$, одредити вероватноћу да систем пређе у стање $|\varphi_2\rangle$ у тренутку t.

2. Наћи у првом и другом реду теорије пертурбације поправку енергије за 1Д ЛХО у првом побуђеном стању ако је пертурбација $\hat{H}' = \alpha\hat{x}^3$.

3. Наћи у првом реду теорије пертурбације померање енергетских нивоа честице у БДП јами
$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{за } x \in (0, a), \\ \infty, & \text{за } x \in (-\infty, 0) \cup (a, \infty), \end{cases}$$
ако је пертурбација
$$V'(x) = \begin{cases} 2V_0 \frac{x}{a}, & \text{за } x \in (0, \frac{a}{2}), \\ 2V_0(1 - \frac{x}{a}), & \text{за } x \in (\frac{a}{2}, a). \end{cases}$$

4. Одредити својствене енергије и својствена стања непертурбованог хамилтонијана и поправке енергије у првом реду теорије пертурбације ако је укупан хамилтонијан
$$H = \begin{pmatrix} 0 & 100 & 1 & 2 \\ 100 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 200 \\ 2 & 3 & 200 & 4 \end{pmatrix}.$$

5. Изотропни 2Д ХО је пертурбован са $\hat{H}' = \alpha \hat{x} \otimes \hat{y}$. Израчунати у првом реду теорије пертурбације раздвајање другог побуђеног нивоа.

6. Пертурбација $H' = \alpha x^2 \otimes y^2$ делује на основно и прва два побуђена стања изотропног 2Д ХО. Одредити поправке енергетских нивоа у првом и другом реду теорије пертурбације дегенерисаних нивоа.

7. Одредити енергију основног стања ЛХО варијационом методом користећи пробне функције облика $\psi_b(x) = Ae^{-bx^2}$.

8. Проценити енергију 2Д изотропног ХО у основном стању варијационом методом користећи пробне функције облика $\psi_\alpha(\rho) = A\rho^2 e^{-\alpha\rho}$.

9. Одредити цепање енергетских нивоа крутог ротатора у равни за пертурбацију $\hat{H}' = \alpha \hat{x} \hat{y}$.

10. Израчунати прву ненулту поправку енергије основног стања честице у бесконачно дубокој сферно симетричној потенцијалној јами за пертурбацију $H' = \alpha r$.

11. Ротатор у простору, момента инерције I и диполног момента $\boldsymbol{d}$ налази се у константном, хомогеном електричном пољу $\boldsymbol{E}$. Одредити поправке енергетских нивоа до другог реда теорије пертурбације сматрајући $-\boldsymbol{E}\boldsymbol{d}$ пертурбацијом.

12. Одредити енергију основног стања атома хелијума у првом реду рачуна пертурбације сматрајући $\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|}$ пертурбацијом.

13. Одредити вероватноћу прелаза система из иницијалног стања $|\varphi_i\rangle$ у финално стање $|\varphi_f\rangle$ у првој и другој апроксимацији ако на систем делује временски зависна пертурбација $\lambda W(t)$. Сматрати да су стања $|\varphi_i\rangle$ и $|\varphi_j\rangle$ својствена стања основног хамилтонијана.

14. Ако на систем делује временски зависна пертурбација

    а) $\lambda W \sin \omega t$;

    б) $\lambda W \cos \omega t$;

    одредити вероватноћу прелаза из иницијалног у финално стање. Какав је резултат ако на систем делује константна пертурбација?

15. За пертурбацију из претходног задатка дискутовати феномен резонанце. Када је резонантна апроксимација оправдана?

16. Који је лимит првог реда апроксимације?

17. Разматрати спрезање са стањима континуалног спектра и извести Фермијево златно правило за константну пертурбацију.

18. На изотропни 3Д ЛХО масе m и наелектрисања q, делује временски зависна пертурбација $q\boldsymbol{E}(t)\boldsymbol{r}$, где је $\boldsymbol{E}(t) = Ae^{-\frac{t^2}{\tau^2}}\boldsymbol{e}_z$, A и τ су реалне константе. Израчунати вероватноћу прелаза из основног стања у $t = -\infty$ у неко побуђено стање у $t = \infty$.

Глава 2

Задаци са претходних рокова

1. Честица се налази у потенцијалу

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{за } x \in (-\infty, 0), \\ -V & \text{за } x \in (0, a), \\ 0 & \text{за } x \in (a, \infty). \end{cases}$$

   Наћи минималну дубину V за коју се појављују везана стања. Разматрати и позитивне и негативне енергије.

2. Проводни електрони у металу се налазе унутар метала због постојања усредњеног потенцијала који се назива унутрашњи потенцијал метала. Израчунати за 1Д модел дат помоћу $V(x) = -V_0$, за $x < 0$ и $V(x) = 0$ за $x > 0$, вероватноћу рефлексије и трансмисије проводних електрона чија је енергија
   а) $E > 0$,
   б) $-V_0 < E < 0$.
   Одредити R и T у случајевима $E \gg V_0$ и $0 < E \ll V_0$. Колика је вероватноћа да се електрон нађе ван метала ($x > 0$) у случају $-V_0 < E < 0$?

3. Одредити коефицијенте рефлексије и трансмисије за честицу масе m која слева налеће на потенцијалну баријеру

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{за } x < 0, \\ -V, & \text{за } 0 < x < a, \\ -2V, & \text{за } x > a. \end{cases}$$

   Сматрати да су a и V позитивне константе.

4. Честице масе m и енергије $(0 < E < V_1)$ се налази у асиметричном потенцијалу који је дат као

$$V(x) = \begin{cases} V_2, & \text{за } x < 0, \\ 0, & \text{за } 0 < x < a, \\ V_1, & \text{за } x > a. \end{cases}$$

   Уколико важи да је $V_2 > V_1 > 0$, одредити диспезиону релацију за везана стања.

5. Честица масе m и енергије $E < U_0$ креће се у пољу потенцијала

$$U(x) = \begin{cases} U_0, \ x \in (-\infty, 0), \\ 0, \ 0 < x < a, \\ U_0, \ x \in (a, \infty), \end{cases}$$

где је U_0 позитивна константа. Одредити дисперзиону једначину и наћи минималну вредност потенцијала за које постоји бар једно везано стање. Искористити идентитет $tg2\alpha = \frac{2tg\alpha}{1-tg^2\alpha}$.

6. Наћи дискретни енергетски спектар и одговарајуће својствене функције честице у потенцијалу ($V_2 > V_1$)

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{за } x < 0, x > c, \\ 0, & \text{за } 0 < x < a, \\ V_2, & \text{за } a < x < b, \\ V_1, & \text{за } b < x < c. \end{cases}$$

7. Одредити дисперзиону релацију за везана стања честице масе m и енергије E која са лева налеће на потенцијалну баријеру $V(x) = \infty$, за $x > |\ell|$, $V(x) = -V_1$, за $x \in (-\ell, -a) \cup (a, \ell)$, $V(x) = -V_2$, за $x \in (-a, a)$ (Сматрати да су V_1 и V_2 позитивне константе и $V_1 < V_2$).

8. Одредити својствене енергије и нормиране таласне функције честице масе m и енергије $E < 0$ која се налази у пољу $V(x) = -\alpha\delta(x)$ ($\alpha > 0$) у импулсној репрезентацији.

9. Честица масе m и енергије $E < 0$ се налази у потенцијалу

$$V(x) = -\alpha\Big(\delta(x-a) + \delta(x+a)\Big), \ \ \alpha > 0.$$

Одредити број везаних стања у зависности од односа параметара α и a.

10. Честица масе m и енергије $E > 0$ се налази у потенцијалу $V(x) = \infty$, за $x < 0$ и $V(x) = -\frac{\hbar^2 g}{2m}\delta(x-a)$, за $x > 0$. Сматрати да је параметар $g > 0$. Израчунати однос коефицијената таласне функције честице у делу $x > a$ (релативна фаза рефлектованих таласа). Како се понаша ова фаза за велике и мале енергије?

11. Честица масе m и енергије $E > 0$ налеће са леве стране на потенцијалну баријеру

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}(g_1\delta(x+a) + g_2\delta(x-a)). \tag{2.1}$$

Израчунати коефицијент трансмисије и показати да у случају $g_1 = -g_2$ постоји специјална вредност енергије за коју је трансмисија 1.

12. Честица се налази у потенцијалу

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{за } x \in (0, a), \\ \infty & \text{за } x \in (a, \infty). \end{cases}$$

Нормирати таласну функцију, наћи еволуцију система и одредити време после којег се систем поново врати у почетно стање ако је

$$\psi(x,t=0)=A\sin(\tfrac{2\pi x}{a})(1+\cos(\tfrac{4\pi x}{a})+\cos(\tfrac{6\pi x}{a})).$$

13. Једнодимензионални систем са потенцијалом $V(x)=\begin{cases}0, & |x|<a\\ \infty, & |x|>a\end{cases}$ се у почетном тренутку налази у стању $\psi(x)_{t=0}=A(e^{-|x|/a}+B)$. Израчунати константе A и B и наћи даљу еволуцију система.

14. Таласна функција слободне честице у почетном тренутку $t=0$ је дата са $\psi(x,t=0)=Ae^{-x^2/2a^2+imv_0x/\hbar}$. Одредити $\psi(x,t)$, као и $\Delta x(t)$.

15. Слободна честица масе m се креће у једној димензији. У почетном тренутку таласна функција је
$$\psi(x,t=0)=(\frac{\alpha}{\pi})^{1/4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0x-\alpha x^2/2},$$
где су α и k_0 реални параметри. Одредити таласну функцију у импулсној репрезентацији у произвољном тренутку $\tilde{\psi}(k,t)$. Одредити $\psi(x,t)$ и вероватноћу $P(x,t)$. Користити $\int dx\mathrm{e}^{-ax^2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx}=\sqrt{\pi/a}\,\mathrm{e}^{-q^2/(4a)}$.

16. Разматрамо бесконачно дубоку потенцијалну јаму ширине $2L$ $(-L<x<L)$ и у њој честицу масе m. Честица се у почетном тренутку налазила у основном стању. Претпоставимо да се у $t=0$ зидови јаме почну померати тако да се ширина јаме удвостручи $(-2L<x<2L)$, при чему се стање честице не мења. Одредити својствене енергије и својствена стања новог Хамилтонијана.

17. Хамилтонијан честице масе m која се креће у дводимензионалној области $(0<y<l,\ -\infty<x<\infty)$ има облик $H=-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2})+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Ако се честица налази у стању $\psi=Ay(y-l)e^{-\alpha x^2/2}(1+x\sqrt{2\alpha})$, где је $\alpha=m\omega/\hbar$, док је A константа коју треба одредити. Израчунати вероватноћу да се приликом мерења енергије честице добије енергија основног стања и средње вредности оператора $\hat{x}$ и $\hat{y}$.

18. Честица масе m и енергије $E<0$ се налази у 3Д привлачном потенцијалу
$$V(x,y,z)=-\frac{\hbar^2}{2m}(\lambda_1\delta(x)+\lambda_2\delta(y)+\lambda_3\delta(z)).\tag{2.2}$$
Одредити својствене енергије и својствене функције, као и неодређеност координате и импулса. Показати да је Хајзенбергов принцип неодређености задовољен.

19. 1Д систем са потенцијалом $V(x)=\begin{cases}kx^2/2, & x\in[0,a)\\ \infty, & x\notin[0,a),\end{cases}$ се налази у стању $\psi(x)=\begin{cases}Ax, & x\in(0,a/2)\\ A(a-x), & x\in(a/2,a)\\ 0, & \text{иначе.}\end{cases}$ Одредити средњу вредност Хамилтонијана у овом стању.

20. На честицу масе m делује потенцијал који је комбинација степеничне функције и привлачног делта потенцијала на ивици степеника, наиме $V(x)=V\Theta(x)-$

$\frac{\hbar^2 g}{2m}\delta(x)$. Уколико је енергија честице $E > V$, одредити коефицијент рефлексије R уколико честица налеће на баријеру са лева. У апроксимацији великих енергија, када је E доминантна скала, одредити како се R разликује у односу на случај када је потенцијал једнак $V(x) = V\Theta(x)$.

21. Честица масе m се налази у бесконачно дубокој потенцијалној јами ширине a. Одредити својствене енергије и својствене функције у координатној и импулсној репрезентацији.

22. Показати да је неодређеност импулса у стању $\psi(x) = \sqrt{1/(2a)}$ за $|x| \leq a$, $\psi(x) = 0$ за $|x| > a$ бесконачна.

23. а) Израчунати $[\hat{x}, f(\hat{p})]$ и $[\hat{a}, f(\hat{a}^\dagger)]$ ако је f аналитичка функција $\hat{p}$ ($\hat{a}^\dagger$).

    б) Одредити таласну функцију $\psi(x, t = 0) = Ae^{-\frac{x^2}{a^2}+\frac{imv_0 x}{\hbar}}$ у импулсној репрезентацији.

24. Честица се описује таласном функцијом $\psi(r) = N\mathrm{e}^{-\alpha r}$, где је N нормализациони фактор и $\alpha > 0$ реалан параметар. Одредити константу N. Наћи очекиване вредности $\langle \boldsymbol{r} \rangle$, $\langle r \rangle$ и $\langle r^2 \rangle$ у овом стању. Колике су неодређености $(\Delta \boldsymbol{r})^2$ и Δr? Одредити таласну функцију у импулсној репрезентацији.

25. Показати да је оператор $U(\eta) = e^{\eta(a^2 - a^{\dagger 2})}$ унитаран (η је реалан број, док су $a^\dagger$ и a оператори креације и анихилације 1Д ЛХО). Показати да за оператор који је дефинисан као
$$g_\pm = U(\eta)(a \pm a^\dagger)U^\dagger(\eta),$$
    важи
$$\frac{d}{d\eta} g_\pm(\eta) = \pm 2 g_\pm(\eta).$$

26. Хамилтонијан 1Д ЛХО је једнак $H = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$. Својствена стања оператора анихилације се називају квази-класична стања. Показати да је стање $|\alpha\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$, где је α комплексан број, својствено стање оператора анихилације $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$. Наћи очекиване вредности x и p у квази-класичном стању. Показати да је у том стању $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$. Претпоставимо да се у $t = 0$ осцилатор налазио у квази-класичном стању $|\alpha_0\rangle$, ($\alpha_0 = \rho \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$) где су ρ и φ реални бројеви. Показати да се у било ком временском тренутку t осцилатор такође налази у квази-класичном стању које се може написати као $e^{-\mathrm{i}\omega t/2}|\alpha(t)\rangle$. Одредити вредност $\alpha(t)$ помоћу ρ, ω, φ и t.

27. Линеарни хармонијски осцилатор у тренутку $t = 0$ се налази у стању $\psi(x, 0) = N\sum_{n=0}^{\infty} c^n \psi_n(x)$, где је $\psi_n(x)$ својствена функција Хамилтонијана за својствену вредност $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ и c познати реални параметар. Одредити нормализациону константу N. У произвољном тренутку t одредити таласну функцију, вероватноћу да се честица поново нађе у почетном стању, као и очекивану вредност Хамилтонијана.

28. Честица момента импулса $l = 1$ налази се у стању

$$\psi(\theta, \varphi) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \cos\theta - \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta \sin\varphi.$$

Наћи вероватноћу да се приликом мерења пројекције на z- осу добије резултат 1. Сматрати да је познат сферни хармоник $Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\varphi}$, а остале израчунати.

29. Израчунати комутаторе (a) $[L_x, r^2]$, $b)$ $[L_y, p^2]$, $c)$ $[L_z, (\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})]$, $d)$ $[L_y, (\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\boldsymbol{r}]$, где су $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{L}$ оператори радијус вектора, импулса и момента импулса честице.

30. Честица момента импулса $l = 1$ налази се у стању $|\psi\rangle = i\frac{\sqrt{3}}{2}|1,1\rangle + \frac{1}{2}|1,0\rangle$. Одредити вероватноћу прелаза у стање које је својствено оператору L_y за својствену вредност $-\hbar$?

31. Показати да у произвољном својственом стању оператора L^2 и L_z, $|l, m\rangle$, важе следеће једнакости:
а)$\langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0$,
б)$\langle L_x L_y\rangle = -\langle L_y L_x\rangle = \frac{i\hbar^2 m}{2}$,
в)$\langle L_x^2\rangle = \langle L_y^2\rangle = \hbar^2 \frac{l(l+1)-m^2}{2}$.

32. Израчунати комутатор компоненти векторских оператора $[L_i, L_j']$, ако је њихова веза задата као $\boldsymbol{L}' = U^\dagger(\boldsymbol{r}_0)\boldsymbol{L}U(\boldsymbol{r}_0)$, где је $U(\boldsymbol{r}_0) = e^{i\boldsymbol{r}_0\boldsymbol{p}}$ ($\hat{L}$ је векторски оператор угаоног момента).

33. Показати да оператор ротације око y-осе за угао $\pi/2$ делује на заједничка својствена стања $\boldsymbol{L}^2$ и L_x за $l = 1$ дајући својствена стања L_z. Доказати релације

$$\begin{aligned} L_x &= -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi L_y/2\hbar} L_z \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi L_y/2\hbar}, \\ 1 &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi L_y/2\hbar} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi L_x/2\hbar} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi L_y/2\hbar} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi L_z/2\hbar}. \end{aligned}$$

34. Израчунати матрицу $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \sigma_{\boldsymbol{n}}$, $\boldsymbol{n}$ је орт ($\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n} = 1$). Колике су очекиване вредности $\langle s_{\boldsymbol{n}}\rangle$ ($s = 1/2$) у својственим стањима оператора s_z?

35. Одредити неодређеност оператора σ_x у произвољном тренутку времена уколико се систем у почетном тренутку налазио у стању $|+\rangle$ и еволуирао је под дејством Хамилтонијана $H = \hbar/2(\sigma_y + \sigma_z)$.

36. Наћи у Хајзенберговој слици оператор L_x пројекције угаоног момента на x осу за линеарни хармонијски осцилатор.

37. Наћи у Хајзенберговој слици оператор p_H^2 квадрата импулса 1Д система на који делује потенцијал $V(x) = -Fx$, $F > 0$.

38. На електрон наелектрисања $-q$ ($q > 0$) и масе m делује потенцијал $V = \frac{1}{4}m\omega_0^2(2z^2 - x^2 - y^2)$. Електрон се налази у магнетном пољу усмереном дуж z-осе (користити гејџ $\boldsymbol{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$).

- Показати да се укупан Хамилтонијан може поделити на два члана, $H_z = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 z^2$ и $H_t = \frac{p_x^2+p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2(x^2+y^2) + \frac{1}{2}\omega_c L_z$, где је $\omega_c = \frac{qB}{m}$. Изразити Ω помоћу ω_c и ω_0.
- Показати да је $H_z = \hbar\omega_0(a_z^\dagger a_z + \frac{1}{2})$, где је $a_z = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}(z + \frac{\mathrm{i}}{m\omega_0}p_z)$ и $a_z^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}(z - \frac{\mathrm{i}}{m\omega_0}p_z)$.
- Дефинишимо два оператора $a_r = \frac{1}{2}\big(\beta(x - \mathrm{i}y) + \frac{\mathrm{i}}{\beta\hbar}(p_x - \mathrm{i}p_y)\big)$ и $a_l = \frac{1}{2}\big(\beta(x + \mathrm{i}y) + \frac{\mathrm{i}}{\beta\hbar}(p_x + \mathrm{i}p_y)\big)$. Показати да је $L_z = \hbar(a_r^\dagger a_r - a_l^\dagger a_l)$ за свако β и да се за одговарајуће β хамилтонијан H_t може написати у форми $H_t = \hbar\omega_c'(a_r^\dagger a_r + \frac{1}{2}) - \hbar\omega_m(a_l^\dagger a_l + \frac{1}{2})$. Одредити ω_c' и ω_m помоћу ω_0 и ω_c.

39. Хамилтонијан електрона у магнетном пољу B је $H = -\mu_B \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{B}$, где су $\boldsymbol{\sigma}$ Паулијеве матрице и μ_B представља Боров магнетон. Одредити статистички оператор у репрезентацији у којој је Паулијева матрица σ_z дијагонална. (Статистички оператор је једнак $\rho = e^{-\beta H}/\ Tr\ e^{-\beta H}$).

40. Изотропни 2Д ЛХО масе m и наелектрисања q се креће у xy равни у којој делује константно и хомогено електрично поље $\boldsymbol{E}_0 = E_0 \boldsymbol{e}_x$. Одредити својствене енергије изотропног 2Д ЛХО и израчунати Δy у основном стању.

41. Посматраћемо рефлексију моноенергетског неутронског снопа који је нормалан на феромагнетни материјал. Оса x је правац пропагације упадног снопа и yz површина феромагнетног материјала, која у потпуности попуњава $x > 0$ област. Нека сваки упадни неутрон има енергију E и масу m. Спин неутрона је $s = 1/2$ и његов магнетни момент се може написати као $\boldsymbol{M} = \gamma \boldsymbol{S}$ (γ је жиромагнетни однос). Потенцијална енергија неутрона је сума два члана:

    - први одговара интеракцији неутрона са материјалом. Феноменолошки, може се представити потенцијалом $V(x)$, који је дефинисан као $V(x) = 0,\ x < 0$, $V(x) = V_0 > 0$ за $x > 0$.

    - други одговара интеракцији магнетног момента сваког неутрона са унутрашњим магнетним пољем $\boldsymbol{B}_0 = B_0 \boldsymbol{e}_z$. Дакле, имамо $W = 0,\ \ x \leq 0,\ W = -\omega_0 S_z,\ \ x > 0$ ($\omega_0 = \gamma B_0$). Разматраћемо случај $0 < \hbar\omega_0 < V_0$.

    а. Одредити стационарна стања неутрона ако је спин:
    1. паралелан; 2. антипаралелан са z осом.

    б. Израчунати коефицијент рефлексије у оба случаја (спин паралелан и антипаралелан са z - осом) ако је енергија неутрона у интервалу $V_0 - \frac{\hbar\omega_0}{2} < E < V_0 + \frac{\hbar\omega_0}{2}$.

42. Неутрон се налази у стационарном магнетном пољу чије су компоненте у цилиндричним координатама

    $$H_\rho = H_\varphi = 0, \quad H_z = H(\rho).$$

    Раздвојити променљиве у Шредингеровој једначини и проблем свести на 1Д који зависи од координате ρ.

43. Магнетна спинска резонанца електрона (*electron spin resonance*) пружа нам корисне информације о електронској структури молекула. У овом задатку ћемо претпоставити следеће: спинске и просторне променљиве су независне и за електроне и за језгра. Просторно основно стање електрона је недегенерисано, тако да можемо да занемаримо орбиталне ефекте магнетног поља. Ми узимамо у обзир следеће магнетне спинске интеракције: Земанову интеракцију спинског магнетног момента са спољашњим пољем B и хиперфину интеракцију између електрона и језгра. Хиперфина интеракција је облика $H_{hf} = A/\hbar^2 \boldsymbol{SI} = A/4 \boldsymbol{\sigma}_e \cdot \boldsymbol{\sigma}_n$, где је $\boldsymbol{S} = \hbar\boldsymbol{\sigma}_e/2$ спин електрона и $I = \hbar\boldsymbol{\sigma}_n/2$ спин језгра. Магнетно поље $\boldsymbol{B}$ делује дуж z - осе. *а.*) Уколико језгро не поседује спин, како изгледају енергетски нивои спина? Узети да је $\omega_e = -\mu_B B$.

   б.) За спин језгра 1/2, написати комплетан Хамилтонијан у базису $\{|\sigma_e, \sigma_n\rangle\}$. Наћи својствене векторе и својствене вредности овог Хамилтонијана. Сматрати да је $\omega_n = -\mu_{nB} B$ и $\eta = (\omega_e - \omega_n)/2$.

   ц.) Претпоставићемо да је магнетно поље B јако, у смислу да је $|\hbar\omega_e| \gg A$. Нека је $A = \hbar a$. Одредити апроксимативно својствене вредности до првог реда по a/η.

   д.) Може се показати да електромагнетно поље може да индукује само прелазе између стања која се разликују за један спин (нпр. прелаз $|-+\rangle \to |+-\rangle$ није дозвољен). Одредити фреквенце прелаза између дозвољних стања.

44. Електрон масе m и наелектрисања q ($q < 0$), налази се у хомогеном и статичком магнетном пољу $\boldsymbol{B}$, усмереном дуж z осе. Хамилтонијан електрона је $H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})^2 - \boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}$. Магнетни момент $\boldsymbol{\mu}$ је повезан са спинским оператором $\boldsymbol{S}$ помоћу $\boldsymbol{\mu} = \gamma\boldsymbol{S}$, где је $\gamma = (1 + a)q/m$. Величина a се назива *аномалија магнетног поља.* У оквиру квантне електродинамике, показује се да је a пропорционално константи фине структуре $a = \frac{\alpha}{2\pi}$ ($\alpha = \frac{1}{137}$). Оператор брзине је једнак $\boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}}{m}$, док је $\omega = \frac{qB}{m}$.

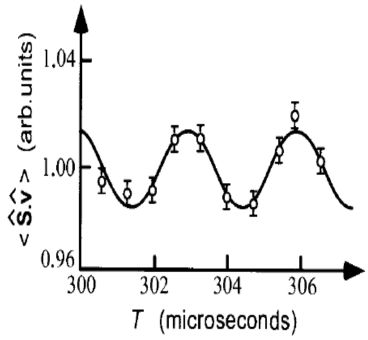
   а) Показати да важе следеће комутационе релације $[v_x, H] = \mathrm{i}\hbar\omega v_y, \;\; [v_y, H] = -\mathrm{i}\hbar\omega v_x$.

   б) Нека су дате три величине $C_1(t) = \langle S_z v_z \rangle$, $C_2(t) = \langle S_x v_x + S_y v_y \rangle$, $C_3(t) = \langle S_x v_x - S_y v_y \rangle$. Израчунати C_1, C_2 и C_3 у произвољном тренутку t?

   в) Како изгледа $\langle \boldsymbol{Sv} \rangle$ у произвољном тренутку?

   г) Сноп електрона брзине је препариран у спинском стању тако да знамо вредности $C_1(0)$, $C_2(0)$ и $C_3(0)$. Сноп интерагује са магнетним пољем $\boldsymbol{B}$ у току временског интервала $[0, T]$. Занемарити интеракцију између електрона у снопу. У тренутку T се мери величина која је пропорционална $\langle \boldsymbol{Sv} \rangle$. Резултат овог мерења је приказан на слици као фунција времена T за вредност магнетног поља $B = 9.4\mathrm{mT}$. Помоћу дате слике одредити приближну вредност величине a.

   д) Да ли се експериментална вредност слаже са предикцијом квантне електродинамике?



45. а) Ненаелектрисана честица спина 1/2 и масе m се креће дуж x осе. Хамилтонијан честице је једнак $H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{\alpha}{E\hbar}\boldsymbol{B}_{eff} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, где је $\boldsymbol{B}_{eff} = \boldsymbol{E} \times p_x \boldsymbol{e}_x$, док је $\boldsymbol{\sigma}$ вектор Паулијевих матрица. Одредити својствене енергије и својствене вредности Хамилонијана уколико је електрично поље $\boldsymbol{E} = E\boldsymbol{e}_z$.

    б) Користећи идеју из претходног примера, одредити својствене енергије и својствене векторе Хамилтонијана $H = \frac{p_x^2+p_y^2}{2m} + \alpha(p_y\sigma_x - p_x\sigma_y)$ честице спина 1/2 која се креће у xy-равни.

46. Крути ротатор у равни момента инерције I и електричног диполног момента $\boldsymbol{d}$ се налази у електричном пољу $\boldsymbol{E}$. У класичној механици угао φ између $\boldsymbol{d}$ и $\boldsymbol{E}$ задовољава диференцијалну једначину $\ddot{\varphi} = -\frac{dE\sin\varphi}{I}$. Уколико проблем третирамо квантно-механички, показати да важи $\frac{d^2}{dt^2}\langle\varphi\rangle = -\frac{dE}{I}\langle\sin\varphi\rangle$. На основу последње једначине видимо да се у одговарајућем лимиту добија израз изведен у класичној механици.

47. У и пре тренутка $t = 0$, честица спина $s = 1/2$ и спинског магнетног момента $\boldsymbol{\mu} = \mu_0\boldsymbol{e}_z$ се налазила у константном магнетном пољу $\boldsymbol{B}_0 = B_0\boldsymbol{e}_z$ у стању са пројекцијом $m = 1/2$ у односу на z - осу. У $t = 0$ се укључује додатно магнетно поље $B_1\boldsymbol{e}_x$ константног интензитета током интервала T. Означићемо правац укупног магнетног поља $\boldsymbol{B} = B_0\boldsymbol{e}_z + B_1\boldsymbol{e}_x$ као z' - осу.

    a) У $t = 0+$, одредити вероватноћу да се систем нађе у стању са пројекцијом $m' = 1/2$ у односу на z' - осу?

    b) У $t = T$, одредити вероватноћу да се систем нађе у стању са пројекцијом $m = -1/2$ у односу на z - осу? (Резултат изразити помоћу $\omega_0 = \mu_0 B_0/\hbar$ и угла θ између z и z'.)

48. Спин 1/2 се налази у статичком магнетном пољу. Оператор магнетног момента има форму $\mu_i = \hbar/2\,\gamma\sigma_i$, где је σ_i Паулијева матрица, док γ даје јачину момента и назива се жиромагнетни однос. Хамилтонијан који одговара интеракцији магнетног момента са спољашњим пољем је $H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}$. Показати да важи

$$\frac{d\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle}{dt} = \gamma\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle \times \boldsymbol{B}. \tag{2.3}$$

49. Честица масе m и наелектрисања q се налази у магнетном пољу $\boldsymbol{B} = (0, 0, B)$. Хамилтонијан честице је једнак $H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})^2$. Разматраћемо три различите калибрације векторског потенцијала које дају исто магнетно поље $\boldsymbol{A}_1 = B(0, x, 0)$, $\boldsymbol{A}_2 = B(-y, 0, 0)$ и $\boldsymbol{A}_3 = 1/2B(-y, x, 0)$. Одредити својствене енергије и показати да својствене функције које одговарају различитим калибрацијама векторског потенцијала задовољавају релације

$$\psi_2 = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qBxy/\hbar}\psi_1, \ \psi_3 = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qBxy/(2\hbar)}\psi_1. \tag{2.4}$$

50. Хамилтонијан електрона у магнетном пољу $\boldsymbol{B}$ је једнак $H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 - \frac{e\hbar}{2m}\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Показати да се исти Хамилтонијан може написати и у облику $\frac{1}{2m}((\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}) \cdot \sigma)^2$ за калибрацију магнетног поља $\boldsymbol{A} = B/2(-y, x, 0)$.

51. У анализи спектра двоатомских молекула $Kratzer$ је предложио потенцијал облика

$$V(r) = -2D(\frac{a}{r} - \frac{1}{2}\frac{a^2}{r^2})$$

са минимумом у $V(a) = -D$. Решити Шредингерову једначину и одредити енергетски спектар, сматрајући да је један атом знатно веће масе од другог (можемо сматрати да је тежи атом непокретан и у њему поставити координатни систем).

52. Одредити својствене енергије изотропног 3Д ЛХО испитивањем асимптотског понашања таласне функције.

53. Честица масе m и енергије $E < 0$ се креће у аксијално симетричном пољу $V(\rho)$.

а) Раздвојити променљиве у Шредингеровој једначини и проблем свести на једнодимензионални, који зависи од параметра ρ.

б) Направити смену $R(\rho) = \chi(\rho)/\sqrt{\rho}$ и упростити једначину.

в) Ако је потенцијал $V(\rho) = -\frac{C}{\rho}$, $(C > 0)$ испитивањем асимптотског понашања таласне функције наћи својствене енергије.

54. За две честице квантних бројева орбиталног угаоног момента $j_1 = j_2 = j$, одредити вектор стандардног базиса $|J = 2j - 2, M_j = 2j - 2\rangle$.

55. За две честице квантних бројева орбиталног угаоног момента $\ell_1 = \ell_2 = 1$, одредити векторе стандардног базиса. Одредити која су од ових стања својствена стања оператора $s_{1z} \otimes s_{2z}$.

56. Наћи резултат мерења $\langle J_{\boldsymbol{n}} \rangle$ пројекције укупног угаоног момента p-електрона $(l = 1)$ на осу $\boldsymbol{n} = \sin\theta\cos\varphi\boldsymbol{e}_x + \sin\theta\sin\varphi\boldsymbol{e}_y + \cos\theta\boldsymbol{e}_z$ у стању $|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|j = \frac{3}{2}, j_z = \frac{1}{2}\rangle + i|s = \frac{1}{2}, s_z = \frac{1}{2}\rangle|l = 1, l_z = -1\rangle)$.

57. Дат је систем три идентичне честице орбиталног угаоног момента $l = 1$ и спинског $s = 1/2$, тако да је базис једночестичног простора стања $\{|1, m; 1/2, m_s\rangle$, $m = -1, 0, 1$; $m_s = -1/2, 1/2\}$. Одредити:

а) димензију укупног простора стања.
б) На које се укупне угаоне момент J разлазе овај простор и колико пута се јавља сваки од њих?
в) Често се разматрају стања која су симетризована у спинском, а антисиметризована у орбитном простору, или обрнуто. Одредити димензију оваквог простора и базис у њему.

58. Систем од два неинтерагујућа идентична фермиона спина $s = \frac{1}{2}$ налази се у 1Д бесконачно дубокој потенцијалној јами ширине a. Ако знамо да је композитно спинско стање синглетно ($S = 0$), и да су им енергије $E_1 = \frac{(\frac{2\pi}{a})^2\hbar^2}{2m}$ и $E_2 = \frac{(\frac{\pi}{a})^2\hbar^2}{2m}$, одредити вероватноћу да се обе честице налазе у левој половини јаме.

59. Разматрати систем два нуклеона (протона или неутрона). Нека је $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ њихов вектор релативног положаја, док су $\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1$ и $\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2$ вектори спинских оператора. Показано је да интеракциона енергија између два нуклеона има сличну форму као класична интеракција између два дипола, тј. може се написати у форми

$$V = V(r)\big[3\frac{(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{r})}{r^2} - \boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\big].$$

То је тзв. "тензор силе". Наравно, није електромагнетног порекла. Показати да се оператор

$$S_{12} = \big[3\frac{(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{r})}{r^2} - \boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\big],$$

који представља спинску зависност "тензора силе", може написати у форми

$$S_{12} = 2\big[\frac{3(\boldsymbol{S}\boldsymbol{r})^2}{r^2} - \boldsymbol{S}^2\big],$$

где је $\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)$ укупан спински оператор.

60. Две честице спина $s_1 = s_2 = 1/2$ се налазе у стању

$$\rho = \alpha_{1+}|1,1\rangle\langle 1,1| + \alpha_{10}|1,0\rangle\langle 1,0| + \alpha_{1-}|1,-1\rangle\langle 1,-1| + \alpha_{00}|0,0\rangle\langle 0,0|$$

(вектори $|l,m\rangle$ су из композитног простора). За константе важи $\alpha_{00} > 0$ и $\sum_{lm}\alpha_{lm} = 1$. Наћи подсистемска стања $\rho_{1/2} = \mathrm{Tr}_{1/2}\rho$. Колики је траг подсистемских стања?

61. Уколико се систем налази у чистом стању $|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle)$, двочестични статистички оператор који одговара том чистом стању је $\rho = |\psi^-\rangle\langle\psi^-|$. Двочестични статистички оператор се може изразити и у форми

$$\rho = \frac{1}{4}(1_2 \otimes 1_2 + \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\sigma} \otimes 1_2 + 1_2 \otimes \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\sigma} + \sum_{i,j=x,y,z} T_{ij}\,\sigma_i \otimes \sigma_j), \tag{2.5}$$

где су σ_i Паулијеве матрице, $\boldsymbol{p}_{1(2)}$ вектори који параметризују једночестичне статистичке операторе ρ_1 и ρ_2, редом, на следећи начин, $\rho_{1(2)} = 1/2(1_2 + \boldsymbol{p}_{1(2)}\boldsymbol{\sigma})$, док је T_{ij} корелациони тензор који описује двочестичну интеракцију. Одредити векторе који описују једночестичне статистичке операторе, као и тензор интеракције. Користити релације, $\rho_1 = Tr_2\rho$, $\rho_2 = Tr_1\rho$, $p_1^i = Tr\rho_1\sigma_i$, $p_2^i = Tr\rho_2\sigma_i$, $T_{ij} = Tr(\sigma_i \otimes \sigma_j)\rho$.

62. Хамилтонијан Хајзенберговог модела спинова $\boldsymbol{S}_n = (S_n^x, S_n^y, S_n^z)$ са квантним бројем $s = 1/2$ на 1Д решетки са N темена и периодичним граничним условима, $\boldsymbol{S}_{N+1} = \boldsymbol{S}_1$, је дат помоћу

$$H = -J\sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{S}_n \boldsymbol{S}_{n+1} = -J\sum_{n=1}^{N}\Big[\frac{1}{2}(S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+) + S_n^z S_{n+1}^z\Big].$$

Показати да је за дати хамилтонијан стање $|F\rangle = |\uparrow\uparrow ... \uparrow\rangle$ својствено са својственом енергијом $E_0 = -JN/4$. N вектора, код којих је само један спин "флипован" на доле, се могу представити као

$$|n\rangle = S_n^-|F\rangle, \qquad n = 1, ..., N.$$

Показати да је стање

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N} e^{ikn}|n\rangle,$$

($k = 2\pi m/N$, $m = 0, ..., N-1$), такође својствено стање хамилтонијана за својствену вредност

$$E = E_0 + J(1 - \cos k).$$

63. Разматрамо систем који се састоји од N електрона и описан је Хамилтонијаном $H = -J\sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_{i+1}$. Сматрати да је $\boldsymbol{S}_{N+1} = \boldsymbol{S}_1$. Показати да је за Хајзенбергов феромагнет ($J > 0$) стање које се састоји од свих спинова са позитивном пројекцијом на z оси својствено са енергијом $E_0 = -\frac{\hbar^2}{4}NJ$. (Стање $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$, ћемо обележавати као $|\uparrow\rangle$, док ће се стање $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ писати као $|\downarrow\rangle$.) Показати да за Хајзенбергов антиферомагнет ($J > 0$), "очигледно" основно стање које се може написати као $|\uparrow\downarrow\uparrow ... \downarrow\rangle$ није својствено стање H. Ово илуструје да је налажење основног стања Хајзенберговог антиферомагнета комплексан проблем.

64. Хамилтонијан спинске интеракције три електрона има форму $H = -J_{12}\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 - J_{23}\boldsymbol{S}_2 \cdot \boldsymbol{S}_3 - J_{13}\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_3$. $\boldsymbol{S}_1$, $\boldsymbol{S}_2$, $\boldsymbol{S}_3$ представљају спинске операторе спинова електрона 1, 2 и 3, респективно, док је J_{ij} константа измене између спинова $\boldsymbol{S}_i$ и $\boldsymbol{S}_j$. Одредити матричне елементе овог Хамилтонијана у базису $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle_1 \otimes |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle_2 \otimes |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle_3$ ($|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle_i$ је својствени вектор оператора S_i^z).

65. Хамилтонијан интеракције два спина 1/2 је једнак $H = -J(t)\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{S}_2$. Одредити матричне елементе H у базису $\{|++\rangle, |s\rangle, |t\rangle, |--\rangle\}$. Уколико је временски интервал спинске интеракције τ, одредити еволуциони оператор $U = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^\tau H dt}$ у истом базису. Узети да је $\varphi = \hbar\int_0^\tau J(t)dt$. Одредити и

$$U_g = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\pi S_1^z}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\pi S_2^z}\, U\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\pi S_2^z}\, U.$$

66. На честицу масе m која се налази у бесконачно дубокој дводимензионалној потенцијалној јами ($0 < x < a$, $0 < y < a$) делује пертурбација $V(x,y) = V_0 \cos^2 \frac{\pi x}{a}$. Одредити раздвајање трећег побуђеног нивоа у првом реду теорије пертурбације.

67. Наћи у првом реду теорије пертурбације цепање првог побуђеног нивоа 3Д ЛХО за пертурбацију $H' = \alpha(xy + yz + zx)$.

68. Наћи у прва два реда теорије пертурбације енергију основног стања 2Д изотропног ЛХО који је изложен пертурбацији $H' = \alpha x^2 y^2$.

69. Одредити у првом и другом реду теорије пертурбације поправку енергије првог побуђеног стања 1Д ЛХО који је изложен дејству пертурбације $-qEx$.

70. Хамилтонијан линеарног хармонијског осцилатора је једнак $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} + \frac{\alpha x^2}{2}$. Третирајући последњи члан као пертурбацију, одредити поправке енергије у прва два реда теорије пертурбације. Упоредити добијени резултат са тачним решењем у случају $\alpha << k$.

71. Одредити поправку енергије основног стања линеарног хармонијског осцилатора у првом и другом реду теорије пертурбације уколико на систем делује пертурбација $\lambda \sin kx$, $\lambda \ll 1$.

72. Хамилтонијан система је $H = \frac{p^2}{2m} - \alpha\delta(x) + b\delta(x)$, $a \gg b$. Одредити својствене енергије система. Сматрајући $b\delta(x)$ пертурбацијом, израчунати енергију основног стања до оног реда теорије пертурбације који даје тачно решење.

73. Јон се налази у кристалном пољу који има форму $V = D(x^4 + y^4 + z^4 - \frac{3}{5}r^4)$. Овај потенцијал делује на дегенерисане d нивое. Непертурбоване таласне функције су својствене функције оператора угаоног момента L_z, $|\pm 2\rangle = R(r)\sin^2\theta \mathrm{e}^{\pm 2\mathrm{i}\varphi}$, $|\pm 1\rangle = 2R(r)\sin\theta\cos\theta \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi}$, $|0\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}R(r)(3\cos^2\theta - 1)$.
   а) Одредити матричне елементе оператора V у овом базису, као и његове својствене вредности и својствене векторе. Показати да је дегенерација само делимично уклоњена, тј. да постоје само две различите својствене енергије.
   б) Када на систем додатно делује константно магнетно поље у z-правцу, дегенерација је потпуно уклоњена. Одредити својствене енергије и својствене векторе у овом случају.

74. Стања парамагнетног јона у кристалној решетки су, у складу са теоријом парамагнетне резонанце, својствене функције спинског хамилтонијана:

$$\begin{aligned} H_s &= aHS_z + bHI_z + \frac{1}{2}D(3\cos^2\theta - 1)[S_z^2 - \frac{1}{3}S^2] + \\ &+ \frac{1}{2}D\sin 2\theta\big[S_+(S_z + \frac{1}{2}) + S_-(S_z - \frac{1}{2})\big]\big] \\ &+ \frac{1}{4}D\sin^2\theta(S_+^2 + S_-^2) + AS_zI_z + \frac{A}{2}(S_+I_- + S_-I_+), \end{aligned}$$

где су S и I спински оператори електона и језгара, редом, a, b, D, A константе, $a \ll b$, и θ угао између осе симетрије кристала и правца магнетног поља H. Означавајући помоћу $|M_S, M_I\rangle$, $(M_S = -S, ..., S; M_I = -I, ..., I)$, својствена стања непертурбованог хамилтонијана $H_0 = aHS_z + bHI_z$, одредити поправке енергије у прва два реда теорије пертурбације.

75. Размотримо систем који се састоји од спина електрона $\boldsymbol{S}$ и два спина језгра $\boldsymbol{I}_1$ и $\boldsymbol{I}_2$. Сви спинови су 1/2.

а. Занемарићемо интеракцију између спинова и претпоставити да се они налазе у хомогеном магнетном пољу $\boldsymbol{B}$ паралелном z - оси. Хамилтонијан система је тада $H_0 = \Omega S_z + \omega I_{1z} + \omega I_{2z}$, где су Ω и ω реалне, позитивне константе, пропорционалне $|\boldsymbol{B}|$. Претпоставимо да је $\Omega > 2\omega$. Одредити својствена стања и дозвољене енергије система.

б. Претпоставимо да се интеракција између спинова урачунава новим чланом у хамилтонијану $W = a(\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{I}_1 + \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{I}_2)$, где је a реална, позитивна константа. Одредити ненулте матричне елементе оператора $a\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{I}_1$ и $a\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{I}_2$ између својствених вредности хамилтонијана H_0.

ц. Уколико претпоставимо да је $a\hbar^2 \ll \hbar\Omega$, тако да W можемо да посматрамо као пертурбацију у односу на H_0, одредити поправке енергије у првом реду теорије пертурбације.

76. Честица масе m се налази у једнодимензионалном потенцијалу $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. У нерелативистичком лимесу, кинетичка енергија је једнака $T = \frac{p^2}{2m}$. Релативистички, импулс и кинетичка енергија су повезани као $T = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} - mc^2$. Одредити прву релативистичку поправку кинетичке енергије (p^4 члан). Користећи ту поправку као пертурбацију, одредити поправку енергије основног стања у првом и другом реду теорије пертурбације.

77. Применити варијациони метод за израчунавање основног стања водониковог атома, користећи као пробне таласне функције следеће изразе који имају сферну симетрију,

$$\psi_1 = A_1 e^{-(b/a_0)r}, \ \psi_2 = A_2 \frac{1}{b^2 + (\frac{r}{a_0})^2}, \ \psi_3 = A_3 \frac{r}{a} e^{-(b/a_0)r},$$

где је a_0 Боров радијус и b произвољна константа.

78. Својствена функција која одговара енергији основног стања линеарног хармонијског осцилатора је облика $Ae^{-\alpha x^2}$. Уз помоћ варијационог метода минимизујте енергију првог побуђеног стања користећи погодно одабрану таласну функцију.

79. Одредити вероватноћу прелаза атома водоника из стања $|n, l, m\rangle$ у $|n', l+1, m'\rangle$ ($|n', l-1, m'\rangle$) због интеракције диполног момента са електричним пољем (Хамилтонијан интеракције је једнак $-q\boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{r}$). Сматрати да су интеграли $I_{n'l',nl} = \int r R^*_{n'l'}(r) R_{nl}(r) dr$ познати. Користити изразе

$\cos\theta Y_l^m = \sqrt{\frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+1)(2l+3)}}^{\frac{1}{2}} Y_{l+1}^m + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1}^m$ и
$\sin\theta Y_l^m = (-\sqrt{\frac{(l+1-m)(l+2-m)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1}^{m-1} + \sqrt{\frac{(l+m)(l-1+m)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1}^{m-1}) e^{i\varphi}$.

80. Атом водоника се налази у електричном пољу $\boldsymbol{E} = (0,0,E)$. Одредити поправке енергије првог побуђеног нивоа ($n = 2$) у првом реду теорије пертурбације. Својствене функције су

$$\begin{aligned}
\psi_{200} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}(a_0)^{3/2}}(2 - \frac{r}{a_0})e^{-r/2a_0}, \qquad (2.6)\\
\psi_{210} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}(a_0)^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\cos\theta,\\
\psi_{21\pm1} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}(a_0)^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\sin\theta e^{\pm i\varphi}.
\end{aligned}$$

81. На 1Д ЛХО делује временски зависна пертурбација $\lambda W(t)$,

$$W(t) = \begin{cases} -qEx & \text{за } t \in [0,\tau],\\ 0 & \text{за } t < 0 \text{ и } t > \tau, \end{cases}$$

где је q наелектрисање, E хомогено електрично поље, и $\hat{x}$ опсервабла координате. Одредити вероватноћу прелаза, P_{01}, из основног у прво побуђено стање користећи први ред теорије временски зависне пертурбације. Израчунати P_{02} у првом и другом реду теорије временски зависне пертурбације.

82. На 1Д ЛХО делује временски зависна пертурбација $\lambda W(t)$,

$$W(t) = \begin{cases} x, & \text{за } t \in [0,\tau],\\ 0, & \text{за } t < 0 \text{ и } t > \tau, \end{cases}$$

где је $\hat{x}$ опсервабла координате. Одредити вероватноћу прелаза из стања $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ у прво и друго побуђено стање у првом реду теорије временски зависне пертурбације.

83. Размотримо атомски ниво угаоног момента $J = 1$ на који делују електрично и магнетно поље, оба паралелна са z - осом. Може се показати да постоје три енергетска нивоа чија су својствена стања $|\varphi_M\rangle$ ($M = -1, 0, 1$) уједно и својствена стања оператора J_z. На овај систем делује временски зависна пертурбација $W(t) = \lambda(J_+e^{-i\omega t} + J_-e^{i\omega t})$.

а. Ако таласна функција еволуира по закону $|\varphi(t)\rangle = \sum_{M=-1}^{1} b_M(t)e^{-iE_Mt/\hbar}|\varphi_M\rangle$, написати систем диференцијалних једначина који задовољава $b_M(t)$.

б. Ако се у почетном тренутку, $t = 0$, систем налазио у стању $|\varphi_{-1}\rangle$, одредити вероватноћу $v_{-1\to1}(t)$ до оног реда теорије пертурбације који даје ненулто решење.

84. Крути ротатор у равни Хамилтонијана $H = L_z^2/(2I) - aL_z$ (a је димензиона константа) се налази у основном стању $|0\rangle$. Његов диполни момент је једнак $\boldsymbol{d} = d\boldsymbol{e}_z$. На ротатор делује временски зависно електрично поље дуж z-осе:

$$E(t) = \left\{ \begin{array}{rl} 0, & \text{за } t < 0, \\ E_0 \mathrm{e}^{-t/\tau} \cos\varphi, & \text{за } t > 0. \end{array} \right.$$

E_0 и τ су позитивне константе. Наћи до другог реда теорије вероватноће прелазе из основног у побуђена стања.

85. Разматрамо систем са два нивоа. Својствена стања Хамилтонијана H_0 су означена као $|1\rangle$ и $|2\rangle$ и њихове својствене вредности су 0 и $\hbar\omega_0$, редом. Нека на систем делује пертурбација H' облика $\hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega\cos(\omega t) \\ \Omega\cos(\omega t) & 0 \end{pmatrix}$. Нека се систем у тренутку $t = 0$ (пре него што је пертурбација почела да делује) налазио у стању $|1\rangle$.

а). Колика је вероватноћа да се систем после времена t нађе у стању $|1\rangle$ ($|2\rangle$)? Да бисте нашли вероватноће прелаза, користити Шредингерову једначину у ротационој слици, где је $H_1 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \omega \end{pmatrix}$ а унитарна еволуција $U = e^{-iH_1 t/\hbar}$, као и rotating wave aproximation која занемарује све експоненцијалне чланове са фреквенцијом 2ω.

б). Размотримо прво π пулс који одговара укључивању поља у $t = 0$ и искључивању у $T = \pi/\Omega$. Колика је вероватноћа прелаза у стање $|2\rangle$ у тренутку T?

в). Потом разматрамо $\pi/2$ пулс који одговара укључивању поља у $t = 0$ и искључивању у $T = \pi/(2\Omega)$. Колика је вероватноћа прелаза у стање $|2\rangle$ у тренутку T?

Глава 3

Решења

3.1 Уводни задаци из вероватноће

1. Вероватноћа да добијемо било који број при бацању коцке је иста и износи $p_1 = p_2 = p_3 = p_4 = p_5 = p_6 = \frac{1}{6}$. Средња вредност величине А, броја који је изашао при бацању коцке износи

$$\langle A\rangle = \sum_{k=1}^{6} p_k\, a_k = \frac{1}{6}(1+2+3+4+5+6) = \frac{21}{6} = \frac{7}{2}. \tag{3.1}$$

2.

$$\langle x\rangle = \sum_k p_k\, x_k \geq \sum_k p_k\, x_{min} = \Big(\sum_k p_k\Big)x_{min} = x_{min}, \tag{3.2}$$

$$\langle x\rangle = \sum_k p_k\, x_k \leq \sum_k p_k\, x_{max} = \Big(\sum_k p_k\Big)x_{max} = x_{max}. \tag{3.3}$$

3.

$$\begin{aligned}\Delta^2(A+B) &= \langle (A+B)^2\rangle - \langle A+B\rangle^2 = \langle A^2+B^2-2AB\rangle - (\langle A\rangle + \langle B\rangle)^2 \\ &= \langle A^2\rangle + \langle B^2\rangle + 2\langle A\rangle\langle B\rangle - \langle A\rangle^2 - \langle B\rangle^2 - 2\langle A\rangle\langle B\rangle \\ &= \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 + \langle B^2\rangle - \langle B\rangle^2 \\ &= \Delta^2(A) + \Delta^2(B). \end{aligned} \tag{3.4}$$

4. Вероватноћа да откаже тачно пет делова апарата ако се апарат укључи једанпут једнака је производу вероватноће да тачно пет делова откаже и вероватноће да тачно пет делова остану исправна помножено фактором $\binom{10}{5}$ који говори на колико начина се то отказивање може десити,

$$\binom{10}{5} p^5 (1-p)^5. \tag{3.5}$$

Вероватноћа да се то деси уколико се апарат укључује 100 пута једнака је

$$100\binom{10}{5} p^5 (1-p)^5. \tag{3.6}$$

5. Нормирањем густине вероватноће на јединицу добијамо константу A,

$$\int_0^{100} f(x)dx = \int_0^{100} Adx = A\int_0^{100} dx = 100\,A = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{100}. \quad (3.7)$$

Вероватноћа да добијемо вредност x у интервалу $(0,5)$ и средња вредност величине x су

$$P(x\in(0,5)) = \int_0^5 \frac{1}{100}dx = \frac{1}{100}\int_0^5 dx = \frac{1}{100}\,5 = \frac{1}{20}, \quad (3.8)$$

$$\langle x\rangle = \int_0^{100} \frac{1}{100}xdx = \frac{x^2}{2\cdot 100}\Big|_0^{100} = 50. \quad (3.9)$$

6. Нормирањем густине вероватноће добијамо константу

$$\int_0^\infty Ae^{-ax}dx = 1 = \frac{A}{a}\int_0^\infty e^{-ax}d(ax) = -\frac{A}{a}e^{-ax}\Big|_0^\infty = \frac{A}{a} = 1 \Rightarrow A = a. \quad (3.10)$$

Вероватноћа да се величина x налази у интервалу $(5,10)$ износи

$$P(x\in(5,10)) = \int_5^{10} ae^{-ax}dx = -\frac{a}{a}\int_5^{10} e^{-ax}d(ax) = e^{-ax}\Big|_5^{10} = e^{-5a} - e^{-10a}. \quad (3.11)$$

Средња вредност величине x једнака је

$$\langle x\rangle = \int_0^\infty ae^{-ax}xdx. \quad (3.12)$$

Парцијалном интеграцијом $\int udv = uv - \int vdu$, где је $u = ax$, $du = adx$, $dv = e^{-ax}dx$ и $v = -\frac{1}{a}e^{-ax}$, средња вредност $\langle x\rangle$ постаје

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= ax(-\frac{1}{a}e^{-ax})\Big|_0^\infty + \int_0^\infty adx\frac{1}{a}e^{-ax} = \int_0^\infty e^{-ax}dx \\ &= -\frac{1}{a}e^{-ax}\Big|_0^\infty = \frac{1}{a}. \quad (3.13)\end{aligned}$$

7. Нормирањем налазимо вредност константе A

$$\int_{-\infty}^\infty Ae^{-bx^2}dx = A\int_{-\infty}^\infty e^{-bx^2}dx = A\sqrt{\frac{\pi}{b}} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{b}{\pi}}, \quad (3.14)$$

где смо искористили решење Поасоновог интеграла $\int_{-\infty}^\infty e^{-bx^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{b}}$.

$$\langle x\rangle = \sqrt{\frac{b}{\pi}}\int_{-\infty}^\infty xe^{-bx^2}dx = 0 \quad (3.15)$$

јер имамо непарну функцију на симетричном домену.

$$\langle x^2\rangle = \sqrt{\frac{b}{\pi}}\int_{-\infty}^\infty x^2e^{-bx^2}dx = 2\sqrt{\frac{b}{\pi}}\int_0^\infty x^2e^{-bx^2}dx. \quad (3.16)$$

Увођењем смене $t = bx^2$, интеграл се трансформише у

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle &= 2\sqrt{\frac{b}{\pi}}\int_0^\infty \sqrt{\frac{t}{b}}e^{-t}\frac{1}{2b}dt = \frac{1}{b\sqrt{\pi}}\int_0^\infty t^{\frac{1}{2}}e^{-t}dt \\ &= \frac{1}{b\sqrt{\pi}}\Gamma(\frac{3}{2}) = \frac{1}{2b\sqrt{\pi}}\Gamma(\frac{1}{2}) = \frac{1}{2b\sqrt{\pi}}\sqrt{\pi} = \frac{1}{2b}, \qquad (3.17)\end{aligned}$$

где смо препознали и искористили гама функцију и особине гама функције $\Gamma(n+1) = \int_0^\infty t^n e^{-t}dt$, $\Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$, $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$. Сада можемо да израчунамо дисперзију величине x

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{\frac{1}{2b}}. \qquad (3.18)$$

8. Нормирањем добијамо следећу једначину

$$1 = \int_{-\infty}^\infty Ae^{-bx^2-cx}dx = A\int_{-\infty}^\infty e^{-b(x^2+\frac{c}{b}x+\frac{c^2}{4b^2})}e^{\frac{c^2}{4b^2}}dx = Ae^{\frac{c^2}{4b^2}}\int_{-\infty}^\infty e^{-b(x+\frac{c}{2b})^2}dx. \qquad (3.19)$$

Сменом $t = x + \frac{c}{2b}$, добијамо

$$Ae^{\frac{c^2}{4b^2}}\int_{-\infty}^\infty e^{-bt^2}dt = Ae^{\frac{c^2}{4b^2}}\sqrt{\frac{\pi}{b}} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{b}{\pi}}e^{-\frac{c^2}{4b^2}}. \qquad (3.20)$$

Средња вредност величине x је

$$\langle x\rangle = \sqrt{\frac{b}{\pi}}e^{-\frac{c^2}{4b^2}}e^{\frac{c^2}{4b^2}}\int_{-\infty}^\infty xe^{-b(x+\frac{c}{2b})^2}dx. \qquad (3.21)$$

Сменом $t = x + \frac{c}{2b}$, израз се трансформише у

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \sqrt{\frac{b}{\pi}}\int_{-\infty}^\infty(t-\frac{c}{2b})e^{-bt^2}dt = \sqrt{\frac{b}{\pi}}\Big(\int_{-\infty}^\infty te^{-bt^2}dt - \frac{c}{2b}\int_{-\infty}^\infty e^{-bt^2}dt\Big) \\ &= -\sqrt{\frac{b}{\pi}}\frac{c}{2b}\int_{-\infty}^\infty e^{-bt^2}dt = -\sqrt{\frac{b}{\pi}}\frac{c}{2b}\sqrt{\frac{\pi}{b}} = -\frac{c}{2b}. \qquad (3.22)\end{aligned}$$

Искористили смо да је, $\int_{-\infty}^\infty te^{-bt^2}dt = 0$, интеграл непарне функције на симетричном домену једнак 0.

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle &= \sqrt{\frac{b}{\pi}}\int_{-\infty}^\infty x^2e^{-b(x+\frac{c}{2b})^2}dx \\ &= \sqrt{\frac{b}{\pi}}\int_{-\infty}^\infty(t-\frac{c}{2b})^2e^{-b(x+\frac{c}{2b})^2}dx \\ &= \sqrt{\frac{b}{\pi}}\Big(\int_{-\infty}^\infty t^2e^{-bt^2}dt - \frac{c}{b}\int_{-\infty}^\infty te^{-bt^2}dt + \frac{c^2}{4b^2}\int_{-\infty}^\infty e^{-bt^2}dt\Big) \\ &= 2\sqrt{\frac{b}{\pi}}\int_0^\infty t^2e^{-bt^2}dt + \frac{c^2}{4b^2}\sqrt{\frac{b}{\pi}}\sqrt{\frac{\pi}{b}} = \frac{1}{2b} + \frac{c^2}{4b^2}. \qquad (3.23)\end{aligned}$$

Искористили смо $\int_{-\infty}^{\infty} te^{-bt^2}dt = 0$, $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-bt^2}dt = \sqrt{\frac{\pi}{b}}$ и $\int_0^{\infty} t^2 e^{-bt^2}dt = \frac{1}{4b}\sqrt{\frac{\pi}{b}}$. Сада коначно добијамо

$$\Delta x = \sqrt{\frac{1}{2b} + \frac{c^2}{4b^2} - \frac{c^2}{4b^2}} = \sqrt{\frac{1}{2b}}. \tag{3.24}$$

3.2 Оператори

1.

$$[AB, C] = ABC - CAB = ABC - ACB + ACB - CAB = A[B, C] + [A, C]B. \tag{3.25}$$

2.

$$[A, BC] = ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA = [A, B]C + B[A, C]. \tag{3.26}$$

3. $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]]$
$= [A, BC - CB] + [B, CA - AC] + [C, AB - BA]$
$= ABC - ACB - BCA + CBA + BCA - BAC - CAB + ACB + CAB - CBA$
$- ABC + BAC = 0.$

4. Доказаћемо ово тврђење индукционом процедуром:

$$\begin{aligned} \textit{БАЗА ИНДУКЦИЈЕ} \quad &: \quad \text{за } m = 1 \Rightarrow [A, B] = 0, \;\; \text{услов задатка}, \\ \textit{ИНДУКТИВНИ КОРАК} \quad &: \quad [A^m, B] = 0 \Rightarrow [A^{m+1}, B] = 0. \end{aligned} \tag{3.27}$$

Задатак (2.1) нам каже да је

$$[A^{m+1}, B] = A[A^m, B] + [A, B]A^m = 0, \tag{3.28}$$

пошто је $[A, B] = 0$ и $[A^m, B] = 0$, на основу чега закључујемо да тврђење важи за $\forall m \in N$.

5.

$$\begin{aligned} \textit{БАЗА ИНДУКЦИЈЕ} \quad &: \quad \text{за } m = 1 \Rightarrow [A, B] = [A, B], \\ \textit{ИНДУКТИВНИ КОРАК} \quad &: \quad [A^m, B] = mA^{m-1}[A, B] \\ &\Rightarrow \quad [A^{m+1}, B] = (m+1)A^m[A, B]. \end{aligned} \tag{3.29}$$

На основу задатка (2.4) знамо да из $[A, [A, B]] = 0 \Rightarrow [A^m, [A, B]] = 0$, тј. $[A, B]A^m = A^m[A, B]$, тако да је

$$\begin{aligned} [A^{m+1}, B] &= A[A^m, B] + [A, B]A^m \\ &= mA^m[A, B] + [A, B]A^m = mA^m[A, B] + A^m[A, B] \\ &= (m+1)A^m[A, B]. \end{aligned} \tag{3.30}$$

6.

$$[A, Ae^{iB}] = A[A, e^{iB}] + [A, A]e^{iB} = A[A, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(iB)^n]. \tag{3.31}$$

Како је $[A, B] = i$, $[A, B^2] = [A, B]B + B[A, B] = 2iB$ и $[A, B^3] = B[A, B^2] + [A, B]B^2 = 3iB$, имамо основа да претпоставимо да је $[A, B^n] = niB^{n-1}$. Ову претпоставку можемо да докажемо индукционом процедуром.

$$\begin{aligned} \textit{БАЗА ИНДУКЦИЈЕ} \quad &: \quad m = 1 \Rightarrow [A, B] = i, \\ \textit{ИНДУКТИВНИ КОРАК} \quad &: \quad [A, B^n] = niB^{n-1} \Rightarrow [A, B^{n+1}] = (n+1)iB^n. \end{aligned} \tag{3.32}$$

$$\begin{aligned} [A, B^{n+1}] &= B[A, B^n] + [A, B]B^n \\ &= BniB^{n-1} + iB^n = (n+1)iB^n. \end{aligned} \tag{3.33}$$

Сада када смо доказали нашу претпоставку, вратимо се изразу (3.31)

$$\begin{aligned} [A, Ae^{iB}] &= A[A, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(iB)^n] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} i^n A[A, B^n] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} i^n AniB^{n-1} = A \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} i^{n-1} i^2 B^{n-1}. \end{aligned} \tag{3.34}$$

Ако направимо смену $m = n - 1$ комутатор је једнак

$$[A, Ae^{iB}] = -A \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} i^m B^m = -Ae^{iB}. \tag{3.35}$$

7. *ПРВИ НАЧИН*

$$\begin{aligned} e^{i\pi A} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(i\pi A)^n \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} i^{2k} \pi^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} i^{2k+1} \pi^{2k+1} A \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} (-1)^k \pi^{2k} + i \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} (-1)^k \pi^{2k+1} A. \end{aligned} \tag{3.36}$$

Искористили смо да је $A^{2k} = I$ и $A^{2k+1} = A^{2k}A = A$. Ако се сетимо да важе следећи идентитети,

$$\cos\varphi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!}(-1)^n \varphi^{2n} \quad \text{и} \quad \sin\varphi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!}(-1)^n \varphi^{2n+1}, \tag{3.37}$$

наш израз се трансформише у

$$e^{i\pi A} = \cos\pi I + i \sin\pi A = -I. \tag{3.38}$$

ДРУГИ НАЧИН

Својствени проблеми оператора A и A^2 су

$$A\psi = \lambda\psi, \qquad A^2\psi = \lambda^2\psi. \tag{3.39}$$

Како знамо да је $A^2 = I$, својствени проблем оператора A^2 је заправо својствени проблем јединичног оператора I, чија је својствена вредност 1,

$$\lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1. \tag{3.40}$$

Ако су спектрална форма оператора A и разлагање јединице,

$$A = 1P_1 - 1P_{-1}, \qquad I = P_{-1} + P_1, \tag{3.41}$$

где су P_1 и P_{-1} пројектори за својствене вредности 1 и -1, редом, онда је спектрална форма оператора $f(A)$

$$f(A) = f(1)P_1 + f(-1)P_{-1}. \tag{3.42}$$

Како је $f(A)$ у нашем случају $e^{i\pi A}$, закључујемо да важи

$$e^{i\pi A} = e^{i\pi}P_1 + e^{-i\pi}P_{-1} = -1P_{-1} - 1P_1 = -I. \tag{3.43}$$

8.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\lambda}(AB) &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{A(\lambda+\epsilon)B(\lambda+\epsilon) - A(\lambda)B(\lambda)}{\epsilon} \\
&= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{A(\lambda+\epsilon)B(\lambda+\epsilon) - A(\lambda)B(\lambda+\epsilon) + A(\lambda)B(\lambda+\epsilon) - A(\lambda)B(\lambda)}{\epsilon} \\
&= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{A(\lambda+\epsilon) - A(\lambda)}{\epsilon}B(\lambda+\epsilon) + A(\lambda)\lim_{\epsilon\to 0}\frac{B(\lambda+\epsilon) - B(\lambda)}{\epsilon} \\
&= \frac{dA(\lambda)}{d\lambda}\lim_{\epsilon\to 0}B(\lambda+\epsilon) + A(\lambda)\frac{dB(\lambda)}{d\lambda} \\
&= \frac{dA(\lambda)}{d\lambda}B(\lambda) + A(\lambda)\frac{dB(\lambda)}{d\lambda}.
\end{aligned} \tag{3.44}$$

Ако је $B = A^{-1}$ једначина (3.44) добија облик

$$\frac{d}{d\lambda}(AA^{-1}) = \frac{dA(\lambda)}{d\lambda}A^{-1}(\lambda) + A(\lambda)\frac{dA^{-1}(\lambda)}{d\lambda}. \tag{3.45}$$

Како је $\frac{d}{d\lambda}(AA^{-1}) = \frac{d}{d\lambda}(I) = 0$, имамо

$$A(\lambda)\frac{dA^{-1}(\lambda)}{d\lambda} = -\frac{dA(\lambda)}{d\lambda}A^{-1}(\lambda). \tag{3.46}$$

Множећи обе стране једнакости оператором $A(\lambda)^{-1}$ са леве стране, стижемо до решења задатка

$$\frac{dA^{-1}(\lambda)}{d\lambda} = -A^{-1}\frac{dA(\lambda)}{d\lambda}A^{-1}(\lambda). \tag{3.47}$$

9. Увешћемо оператор,
$$g(A,B,\alpha) = e^{\alpha B} A e^{-\alpha B}, \tag{3.48}$$
и развићемо га у ред,
$$g(A,B,\alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{dg^n}{d\alpha^n}\Big|_{\alpha=0}. \tag{3.49}$$
Како важе следеће једнакости $\frac{d^0 g}{d\alpha^0} = A$,[1]
$$\begin{aligned} \frac{dg}{d\alpha} &= Be^{\alpha B} A e^{-\alpha B} + e^{\alpha B} A(-B) e^{-\alpha B} \\ &= Be^{\alpha B} A e^{-\alpha B} - e^{\alpha B} A e^{-\alpha B} B = [B, e^{\alpha B} A e^{\alpha B}] \\ &= e^{\alpha B}[B, Ae^{-\alpha B}] + [B, e^{\alpha B}] A e^{-\alpha B} \\ &= e^{\alpha B}[B, Ae^{-\alpha B}] \\ &= e^{\alpha B} A [B, e^{-\alpha B}] + e^{\alpha B}[B, A] e^{-\alpha B} \\ &= e^{\alpha B}[B, A] e^{-\alpha B}, \end{aligned} \tag{3.50}$$
$$\begin{aligned} \frac{dg^2}{d\alpha^2} &= \frac{d}{d\alpha}(e^{\alpha B}[B,A]e^{-\alpha B}) \\ &= Be^{\alpha B}[B,A]e^{-\alpha B} - e^{\alpha B}[B,A]e^{-\alpha B} B = Bg \\ &= [B, e^{\alpha B}[B,A]e^{-\alpha B}], \end{aligned} \tag{3.51}$$
није тешко на основу овог закључити да је
$$\frac{dg^n}{d\alpha^n} = [\underbrace{B, ...[B}_{n-1}, e^{\alpha B}[B,A]e^{-\alpha B}]...], \tag{3.52}$$
што нам даје
$$\frac{dg^n}{d\alpha^n}\Big|_{\alpha=0} = [\underbrace{B, ...[B}_{n-1}, [B,A]]...]. \tag{3.53}$$
Ако уврстимо претходно добијене резултате у $g(A,B,1)$
$$g(A,B,1) = e^B A e^{-B} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\underbrace{B, ...[B}_{n-1}, [B,A]]...], \tag{3.54}$$
добијамо тврђење датог задатка.

10. Уколико израз из текста задатка помножимо са десне стране оператором e^{-H}, добијамо
$$A - \mathrm{e}^{H} A \mathrm{e}^{-H} = \int_0^1 d\lambda \mathrm{e}^{\lambda H}[A, H]\mathrm{e}^{-\lambda H}. \tag{3.55}$$

[1] Искористили смо да оператори B и $e^{-\alpha B}$ комутирају, што је јасно из чињенице да је $e^{-\alpha B}$ степена функција од B, а $[B, B^n] = 0$ за било који степен n.

Уколико искористимо резултат претходног задатка, израз 3.55 можемо да развијемо у ред

$$A-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}[\underbrace{H,...[H}_{n},A]...]=-\int_0^1 d\lambda\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}[\underbrace{H,...[H}_{n},[H,A]]...] \tag{3.56}$$

Интеграљењем десне стране претходне једначине по λ добијамо

$$-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}[\underbrace{H,...[H}_{n},A]...]=-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(n+1)!}[\underbrace{H,...[H}_{n},[H,A]]...] \tag{3.57}$$

Сменом $m\to n+1$ на десној страни једнакости,

$$-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}[\underbrace{H,...[H}_{n},A]...]=-\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{(m)!}[\underbrace{H,...[H}_{m},A]...], \tag{3.58}$$

видимо да су лева и десна страна једначине идентичне, чиме смо добили тврђење задатка.

11. Доказ математичком индукцијом

$$\begin{aligned}\textit{БАЗА ИНДУКЦИЈЕ}\quad &:\quad m=1\Rightarrow[A,B]=\sum_{s=0}^{0}A^0[A,B]A^{1-0-1}=[A,B].\\ \textit{ИНДУКТИВНИ КОРАК}\quad &:\quad [A^m,B]=\sum_{s=0}^{m-1}A^s[A,B]A^{m-s-1}\\ &\qquad\Rightarrow[A^{m+1},B]=\sum_{s=0}^{m}A^s[A,B]A^{m-s}.\end{aligned} \tag{3.59}$$

Како је

$$\begin{aligned}[A^{m+1},B] &= [A^m,B]A+A^m[A,B]=\sum_{s=0}^{m-1}A^s[A,B]A^{m-s-1}+A^m[A,B]\\ &= \sum_{s=0}^{m}A^s[A,B]A^{m-s},\end{aligned} \tag{3.60}$$

тврђење је доказано.

12. Увешћемо функцију $T(t)=\mathrm{e}^{tA}\mathrm{e}^{tB}$. Извод те функције по параметру t је

$$\begin{aligned}\frac{dT}{dt} &= Ae^{tA}e^{tB}+e^{tA}Be^{tB}=(A+e^{tA}Be^{-tA})e^{tA}e^{tB}\\ &= (A+e^{tA}Be^{-tA})T(t).\end{aligned} \tag{3.61}$$

Оператор $e^{tA}B$ можемо да напишемо као

$$e^{tA}B = [e^{tA}, B] + Be^{tA}, \tag{3.62}$$

где је $[e^{tA}, B]$ комутатор који можемо да упростимо. Да бисмо њега израчунали морамо да искористимо резултат претходног задатка

$$\begin{aligned} [e^{tA}, B] &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(tA)^n, B] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!}[A^n, B] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \sum_{k=0}^{n-1} A^k [A, B] A^{n-k-1}. \end{aligned} \tag{3.63}$$

Задатак 4 нам каже да уколико важи импликација

$$[[A, B], A] = 0 \Rightarrow [[A, B], A^{n-k-1}] = 0, \tag{3.64}$$

можемо да напишемо $[A, B]A^{n-k-1} = A^{n-k-1}[A, B]$ тако да се наш комутатор трансформише у

$$\begin{aligned} [e^{tA}, B] &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \sum_{k=0}^{n-1} A^k A^{n-k-1}[A, B] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \sum_{k=0}^{n-1} A^{n-1}[A, B] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} n A^{n-1}[A, B] = t \sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} A^{n-1}[A, B] \\ &= te^{tA}[A, B] = t[A, B]e^{tA}. \end{aligned} \tag{3.65}$$

Сада имамо $e^{tA}B = t[A, B]e^{tA} + Be^{tA}$, тако да је

$$e^{tA}Be^{-tA} = t[A, B]e^{tA}e^{-tA} = Be^{tA}e^{-tA} = t[A, B] + B, \tag{3.66}$$

и једначина (3.61) добија облик

$$\frac{dT(t)}{dt} = (A + B + t[A, B])T(t) \Rightarrow dT(t)T^{-1} = (A + B + t[A, B])dt. \tag{3.67}$$

Како је $[\frac{dT(t)}{dt}, T(t)] = 0$, последњу једначину можемо интегралити у заједничком својственом базису као да фигуришу бројеви и добијамо

$$T(t) = e^{(A+B)t + \frac{t^2}{2}[A,B]}. \tag{3.68}$$

За $t = 1$ добијамо

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{[A,B]}{2}}, \tag{3.69}$$

што се и тражило.

13. *ЛИНЕАРНОСТ*

$$-i\hbar\frac{d}{dx}(\alpha f(x)+\beta g(x)) = -i\hbar\alpha\frac{df(x)}{dx} - i\hbar\beta\frac{dg(x)}{dx} \tag{3.70}$$

ХЕРМИТИЧНОСТ

Оператор p је хермитски акко важи $(f, p\,g) = (p\,f, g)$.

$$\begin{aligned}(f,p\,g) &= -i\hbar\int_a^b f^*(x)\frac{dg(x)}{dx}dx = -i\hbar\int_a^b f^*(x)dg \\ &= -i\hbar\Big[\underbrace{f^*(x)g(x)\Big|_a^b}_{=0} - \int_a^b \frac{df^*}{dx}g(x)dx\Big] \\ &= i\hbar(\frac{df}{dx}, g) = (-i\hbar\frac{d}{dx}f, g) \\ &= (pf, g).\end{aligned} \tag{3.71}$$

14. Како оператори A и B комутирају, имају заједнички својствени базис. Својствени проблем оператора A је

$$\det|A-\lambda I| = 0 \Rightarrow \det|A-\lambda I| = \frac{1}{2}\begin{vmatrix} 3-\lambda' & 1 & 0 \\ 1 & 3-\lambda' & 0 \\ 0 & 0 & 4-\lambda' \end{vmatrix}, \quad \lambda' = 2\lambda. \tag{3.72}$$

Решења ове својствене једначине су

$$\lambda'_{1,2} = 4,\ \lambda'_3 = 2 \Rightarrow \lambda_{1,2} = 2,\ \lambda_3 = 1. \tag{3.73}$$

Решаваћемо прво својствени проблем за својствену вредност 1, $A|1\rangle = 1|1\rangle$,

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 3a+b=2a \\ a+3b=2b \\ 4c=2c \end{pmatrix} \Rightarrow a=-b, c=0. \tag{3.74}$$

Нормирањем својственог вектора добијамо

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{3.75}$$

Можемо да проверимо да је овај вектор својствени вектор за својствену вредност 1 оператора B.

У потпростору $V_{\lambda=2}$ постоје два базисна вектора. Њих налазимо из једначине

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 3a+b=4a \\ a+3b=4b \\ 4c=4c \end{pmatrix} \Rightarrow a=b, c \text{ - произвољно.} \tag{3.76}$$

Сада налазимо базисне векторе потпростора $V_{\lambda=2}$,

$$|2,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}, \quad |2,2\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}. \tag{3.77}$$

Ови вектори нису својствени за оператор B тако да морамо решити својствени проблем редукованог оператора B у потпростору $V_{\lambda=2}$. Пројектор за својствену вредност 2 је

$$P_{\lambda=2} = |2,1\rangle\langle 2,1| + |2,2\rangle\langle 2,2| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&1&0\\1&1&0\\0&0&2\end{pmatrix}. \tag{3.78}$$

Редуковани B оператор је онда

$$B_2 = P_{\lambda=2}BP_{\lambda=2} = P^2_{\lambda=2}B = P_{\lambda=2}B = \frac{1}{6}\begin{pmatrix}5&5&-2\\5&5&-2\\-2&-2&8\end{pmatrix}. \tag{3.79}$$

Својствене вредности B_2 су

$$\det|B_2 - \lambda I| = 0 \Rightarrow \det|B - \lambda I| = \frac{1}{6}\begin{vmatrix}5-6\lambda&5&-2\\5&5-6\lambda&-2\\-2&-2&8-6\lambda\end{vmatrix}. \tag{3.80}$$

Решења ове својствене једначине су

$$\lambda_1 = 1,\ \lambda_2 = 1, \tag{3.81}$$

док су својствени вектори, обележићемо их као $|2\rangle$ и $|3\rangle$,

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}1\\1\\2\end{pmatrix}, \quad |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\1\\-1\end{pmatrix}. \tag{3.82}$$

Ови вектори су својствени и за оператор A. Оператори A и B у базису $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ имају облик

$$A = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&2\end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&2\end{pmatrix}. \tag{3.83}$$

15. Постоји ортонормирани базис $\beta = \{|i\rangle\}$, па је

$$Tr(|u\rangle\langle v|) = \sum_i \langle i|u\rangle\langle v|i\rangle = \sum_i \langle v|i\rangle\langle i|u\rangle = \langle v|\Big(\sum_i |i\rangle\langle i|\Big)|u\rangle = \langle v|u\rangle. \tag{3.84}$$

Искористили смо да је $\sum_i |i\rangle\langle i| = I$, зато што је то израз за декомпозицију јединице у Дираковој нотацији.

16. Оператор H је хермитски уколико важи $\langle x|Hy\rangle = \langle Hx|y\rangle$. Како је

$$\langle x|A^\dagger Ay\rangle = \langle (A^\dagger)^\dagger x|Ay\rangle = \langle Ax|Ay\rangle = \langle A^\dagger Ax|y\rangle \tag{3.85}$$

и

$$\langle x|AA^\dagger y\rangle = \langle A^\dagger x|A^\dagger y\rangle = \langle (A^\dagger)^\dagger A^\dagger x|y\rangle = \langle AA^\dagger x|y\rangle, \tag{3.86}$$

закључујемо да су оператори $AA^\dagger$ и $A^\dagger A$ хермитски. Оператори су позитивни јер је средња вредност сваког вектора x већа од нуле

$$\langle x|A^\dagger Ax\rangle = \langle (A^\dagger)^\dagger x|Ax\rangle = \langle Ax|Ax\rangle = |Ax|^2 \geq 0, \tag{3.87}$$

$$\langle x|AA^\dagger x\rangle = \langle A^\dagger x|A^\dagger x\rangle = |A^\dagger x|^2 \geq 0. \tag{3.88}$$

На основу

$$Tr(A^\dagger A) = \sum_i \langle i|A^\dagger A|i\rangle = \sum_i \langle Ai|Ai\rangle = \sum_i |Ai|^2, \tag{3.89}$$

$$Tr(AA^\dagger) = \sum_i \langle i|AA^\dagger|i\rangle = \sum_i \langle A^\dagger i|A^\dagger i\rangle = \sum_i |A^\dagger i|^2, \tag{3.90}$$

закључујемо да је $Tr(A^\dagger A) = 0$ акко је $|Ai|^2 = 0$ за $\forall i$ и $Tr(AA^\dagger) = 0$ акко је $|A^\dagger i|^2 = 0$ за $\forall i$. То је могуће само како је $A = 0 \Rightarrow A^\dagger = 0$. Са друге стране, ако је $A = 0$, јасно је да је $|Ai|^2 = 0$ за $\forall i$ и $|A^\dagger i|^2 = 0$ за $\forall i$, тако да је онда $Tr(A^\dagger A) = Tr(AA^\dagger) = 0$.

17. *а)* Оператор A у својственом базису се може написати у облику $A = \sum_\ell a_\ell |\ell\rangle\langle\ell|$ тако да је

$$\langle m|A|n\rangle = \langle m|\sum_\ell a_\ell|\ell\rangle \underbrace{\langle\ell|n\rangle}_{\delta_{\ell n}} = \langle m|\sum_\ell \delta_{\ell n} a_\ell|\ell\rangle = a_n \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{nm}} = a_n\delta_{nm}. \tag{3.91}$$

б) Ако је оператор A унитаран важи $AA^\dagger = I$. Оператори A и $A^\dagger$ у својственом базису изгледају као $A = \sum_\ell a_\ell|\ell\rangle\langle\ell|$ и $A^\dagger = \sum_k a_k^*|k\rangle\langle k|$, тако да услов унитарности постаје

$$I = AA^\dagger = \sum_{\ell,k} a_\ell\, a_k^* |\ell\rangle \underbrace{\langle\ell|k\rangle}_{\delta_{\ell\, k}} \langle k| = \sum_{\ell,k} \delta_{\ell\, k}\, a_\ell\, a_k^* |\ell\rangle\langle k| = \sum_\ell |a_\ell|^2 |\ell\rangle\langle\ell|. \tag{3.92}$$

Са друге стране, ако се сетимо да је декомпозиција јединице

$$I = \sum_\ell |\ell\rangle\langle\ell|, \tag{3.93}$$

услов унитарности постаје $|a_\ell| = 1, \quad \forall\ell \Rightarrow a_\ell = e^{i\varphi_\ell}, \quad \forall\ell$. Сада можемо да израчунамо матрични елемент $\langle m|A|n\rangle$, који је једнак

$$\langle m|A|n\rangle = \langle m|\sum_\ell e^{i\varphi_\ell}|\ell\rangle \underbrace{\langle\ell|n\rangle}_{\delta_{\ell\, n}} = \langle m|\sum_\ell e^{i\varphi_\ell}\delta_{\ell\, n}|\ell\rangle = e^{i\varphi_n}\langle m|n\rangle = e^{i\varphi_n}\delta_{mn}. \tag{3.94}$$

в) Када је A пројектор, може се написати у форми $A = \sum_\ell |\ell\rangle\langle\ell|$, али треба знати да ово није декомпозиција јединице, јер нису сви вектори базиса својствени за A, тако да је

$$\langle m|A|n\rangle = \langle m|\sum_\ell |\ell\rangle\langle\ell|n\rangle = \begin{cases} 0, & \text{ако } |n\rangle \text{ није св. вектор } A, \\ \delta_{mn}, & \text{ако јесте.} \end{cases} \tag{3.95}$$

18.

$$Tr(A+B) = \sum_n \langle n|A+B|n\rangle = \sum_n \langle n|A|n\rangle + \sum_n \langle n|B|n\rangle = TrA + TrB. \tag{3.96}$$

$$\begin{aligned} Tr(AB) &= \sum_k \langle k|AB|k\rangle = \sum_k \langle k|AIB|k\rangle = \sum_k \langle k|A\sum_n |n\rangle\langle n|B|k\rangle \\ &= \sum_{n,k} \langle k|A|n\rangle\langle n|B|k\rangle = \sum_{n,k} \langle n|B|k\rangle\langle k|A|n\rangle \\ &= \sum_n \langle n|B\underbrace{\Big(\sum_k |k\rangle\langle k|\Big)}_{\text{Ово је } I}A|n\rangle \\ &= \sum_n \langle n|BA|n\rangle = Tr(BA). \end{aligned} \tag{3.97}$$

19. Ако радимо у својственом базису оператора A

$$\det A = \prod_n a_n, \quad e^{Tr\ln A} = e^{\sum_n \ln a_n} = e^{\ln \prod_n a_n} = \prod_n a_n. \tag{3.98}$$

20. Адјунговани оператор оператора a је

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{m\omega\hbar}}p\Big). \tag{3.99}$$

Знајући да су једине ненулте комутационе релације $[x,p] = \mathrm{i}\hbar$ и $[p,x] = \mathrm{i}\hbar$, док је $[x,x] = 0$ и $[p,p] = 0$, можемо да израчунамо комутатор $[a,a^\dagger]$ на следећи начин

$$\begin{aligned} [a,a^\dagger] &= \Big[\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{m\omega\hbar}}p\Big), \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{m\omega\hbar}}p\Big) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar}[x,x] - \frac{\mathrm{i}}{2\hbar}[x,p] + \frac{\mathrm{i}}{2\hbar}[p,x] + \frac{1}{2m\omega\hbar}[p,p] \qquad (3.100) \\ &= -\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\mathrm{i}\hbar + \frac{\mathrm{i}}{2\hbar}(-\mathrm{i}\hbar) = 1. \qquad (3.101) \end{aligned}$$

Сада је лако израчунати комутаторе $[N,a]$,

$$[N,a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger[a,a] + [a^\dagger,a]a = -a, \tag{3.102}$$

и $[N, a^\dagger]$,

$$[N, a^\dagger] \;=\; [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger [a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger] a = a^\dagger. \tag{3.103}$$

Потребно је да Хамилтонијан H изразимо помоћу оператора креације и анихилације,

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2. \tag{3.104}$$

Како је

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger), \\ p &= -\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a - a^\dagger), \end{aligned} \tag{3.105}$$

лако добијамо

$$\begin{aligned} x^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega}(a + a^\dagger)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(aa + aa^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger), \\ p^2 &= -\frac{m\omega\hbar}{2}(a - a^\dagger)^2 = -\frac{m\omega\hbar}{2}(aa - aa^\dagger - a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger). \end{aligned} \tag{3.106}$$

Сада је

$$\begin{aligned} H &= -\frac{m\omega\hbar}{4m}(aa - aa^\dagger - a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger) + \frac{\hbar m\omega^2}{4m\omega}(aa + aa^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger) \\ &= \frac{\hbar\omega}{4}(-aa + aa^\dagger + a^\dagger a - a^\dagger a^\dagger) + \frac{\hbar\omega}{4}(aa + aa^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}(aa^\dagger + a^\dagger a). \end{aligned} \tag{3.107}$$

Уколико искористимо да је $aa^\dagger + a^\dagger a = [a, a^\dagger] + 2a^\dagger a = 2a^\dagger a + 1 = 2N + 1$, добијамо

$$H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}). \tag{3.108}$$

21.

$$[\hat{x}, \hat{U}(a)] = [\hat{x}, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-\frac{ia\hat{p}}{\hbar})^n] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-\frac{ia}{\hbar})^n [\hat{x}, \hat{p}^n]. \tag{3.109}$$

Да бисмо израчунали комутатор $[\hat{x}, \hat{U}(a)]$, потребно нам је да знамо колико је $[\hat{x}, \hat{p}^n]$. Како је $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$,

$$[\hat{x}, \hat{p}^2] = \hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p} = i\hbar\hat{p} + i\hbar\hat{p} = 2i\hbar\hat{p}, \tag{3.110}$$

$$[\hat{x}, \hat{p}^3] = \hat{p}[\hat{x}, \hat{p}^2] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p}^2 = \hat{p} * 2i\hbar\hat{p} + i\hbar\hat{p}^2 = 3i\hbar\hat{p}^2, \tag{3.111}$$

имамо основа да претпоставимо да је $[\hat{x},\hat{p}^n] = ni\hbar\hat{p}^{n-1}$. Ту претпоставку ћемо доказати математичком индукцијом.

$$\begin{aligned} \textit{БАЗА ИНДУКЦИЈЕ} &: \quad n=1 \Rightarrow [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar. \\ \textit{ИНДУКТИВНИ КОРАК} &: \quad [\hat{x},\hat{p}^n] = ni\hat{p}^{n-1} \Rightarrow [\hat{x},\hat{p}^{n+1}] = (n+1)i\hat{p}^n. \end{aligned} \tag{3.112}$$

$$\begin{aligned} [\hat{x},\hat{p}^{n+1}] &= \hat{p}\,[\hat{x},\hat{p}^n] + [\hat{x},\hat{p}]\,\hat{p}^n \\ &= \hat{p}ni\hat{p}^{n-1} + i\hat{p}^n = (n+1)i\hat{p}^n. \end{aligned} \tag{3.113}$$

Када смо израчунали $[\hat{x},\hat{p}^n]$, можемо да се вратимо комутатору $[\hat{x},\hat{U}(a)]$

$$\begin{aligned} [\hat{x},\hat{U}(a)] &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(-\frac{ia}{\hbar})^n ni\hbar\hat{p}^{n-1} = \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}(-\frac{ia}{\hbar})^n i\hbar\hat{p}^{n-1}}_{\text{направимо смену } m=n-1} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}(-\frac{ia}{\hbar})^{m+1}\hat{p}^m i\hbar = a\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}(-\frac{ia\hat{p}}{\hbar})^m \\ &= a\hat{U}(a). \end{aligned} \tag{3.114}$$

На основу једначине (3.114) видимо да је $\hat{x}\hat{U}(a) = a\hat{U}(a) + \hat{U}(a)\hat{x}$. Ако са $\hat{x}\hat{U}(a)$ делујемо на својствени вектор $|x\rangle$ и искористимо да је $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$,

$$\hat{x}\hat{U}(a)|x\rangle = (a\hat{U}(a) + \hat{U}(a)\hat{x})|x\rangle = (a\hat{U}(a) + \hat{U}(a)x)|x\rangle = (x+a)\hat{U}(a)|x\rangle, \tag{3.115}$$

видимо да је $\hat{U}(a)|x\rangle$ својствени вектор оператора $\hat{x}$ за својствену вредност x, па је

$$\hat{U}(a)|x\rangle = |x+a\rangle. \tag{3.116}$$

22. *a)* За малу вредност параметра ϵ добијамо

$$\underbrace{\langle x|\hat{U}(\epsilon)}_{\langle x-\epsilon|}|\psi\rangle = \langle x-\epsilon|\psi\rangle = \psi(x-\epsilon) = \psi(x) - \epsilon\frac{d\psi}{dx}. \tag{3.117}$$

Са друге стране, како за мале вредности ϵ важи

$$\hat{U}(\epsilon) = e^{-i\epsilon\frac{\hat{p}}{\hbar}} = I - \frac{i\epsilon\hat{p}}{\hbar}, \tag{3.118}$$

добијамо

$$\langle x|\hat{U}(\epsilon)|\psi\rangle = \langle x|I - \frac{i\epsilon p}{\hbar}|\psi\rangle = \langle x|\psi\rangle - \frac{i\epsilon}{\hbar}\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = \psi(x) - \frac{i\epsilon}{\hbar}\langle x|\hat{p}|\psi\rangle, \tag{3.119}$$

што нам даје

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar\frac{d\psi}{dx}. \tag{3.120}$$

б)
$$\langle x|\hat{x}|\psi\rangle = \langle x|x|\psi\rangle = x\langle x|\psi\rangle = x\psi(x). \tag{3.121}$$

в)
$$\langle x|\hat{x}|x'\rangle = \langle x|x'|x'\rangle = x'\langle x|x'\rangle = x'\delta(x-x'). \tag{3.122}$$

Задаци *г)* и *д)* су предвиђени за самосталан рад.

23. Својствена једначина $(\alpha\hat{p}+\beta\hat{x})|\psi\rangle = A|\psi\rangle$ у координатној репрезентацији изгледа као
$$-i\hbar\alpha\frac{d\psi}{dx} + \beta x\psi = A\psi. \tag{3.123}$$
Ова једначина може да се напише у облику
$$\frac{d\psi}{dx} = i\psi\frac{A-\beta x}{\alpha\hbar} \Rightarrow \frac{d\psi}{\psi} = \frac{i}{\alpha\hbar}(A-\beta x)dx. \tag{3.124}$$
Интеграцијом последње једначине добијамо
$$\ln\psi = \frac{i}{\alpha\hbar}(Ax - \frac{\beta x^2}{2}) + \ln C \Rightarrow \psi(x) = Ce^{\frac{i}{\hbar\alpha}(-\frac{\beta}{2}x^2+Ax)}. \tag{3.125}$$

24. Знамо да је
$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = \langle x|p|p\rangle = p\langle x|p\rangle. \tag{3.126}$$
Са друге стране, ако напишемо
$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = \langle x|\hat{p}\underbrace{\int dx'|x'\rangle\langle x'|}_{\text{јединични оператор}}p\rangle = \int dx'\langle x|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|p\rangle, \tag{3.127}$$
и искористимо да је $\langle x|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x-x')$, добијамо
$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = -i\hbar\int dx'\langle x'|p\rangle\frac{d}{dx}\delta(x-x')\langle x'|p\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\langle x|p\rangle. \tag{3.128}$$
Упоређивањем једначина (3.126) и (3.128) добијамо
$$-i\hbar\frac{d\langle x|p\rangle}{dx} = p\langle x|p\rangle \Rightarrow \frac{d\langle x|p\rangle}{\langle x|p\rangle} = i\frac{p}{\hbar}dx \Rightarrow \langle x|p\rangle = Ce^{i\frac{p}{\hbar}x}. \tag{3.129}$$
Сада нам преостаје да нађемо константу нормирања C,
$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p') \Leftrightarrow \langle p|\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}|x\rangle\langle x|}_{I}p'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle = \delta(p-p'). \tag{3.130}$$
Даље, ако искористимо $\langle x|p\rangle$, добијамо
$$\delta(p-p') = \int_{-\infty}^{\infty}\langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle = |C|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x}dx = |C|^2 2\pi\hbar\delta(p-p'), \tag{3.131}$$

на основу чега је

$$|C|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \tag{3.132}$$

па су $\langle x|p\rangle$ и $\langle p|x\rangle$, редом

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}, \qquad \langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{p}{\hbar}x}. \tag{3.133}$$

25. Веза између таласне функције у координатној репрезентацији $\psi(x)$ и таласне функције у импулсној репрезентацији $\tilde{\psi}(p)$ је следећа

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp, \tag{3.134}$$

док је веза $\tilde{\psi}(p)$ и $\psi(x)$

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx, \tag{3.135}$$

У нашем задатку треба наћи $\tilde{\psi}(p)$,

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{\pi/\alpha} C \sin(\alpha x) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx = \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{\pi/\alpha} \frac{1}{2i}(e^{i\alpha x} - e^{-i\alpha x}) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx \\
&= \frac{C}{2i\sqrt{2\pi\hbar}} \Big[\int_0^{\pi/\alpha} e^{i(\alpha - \frac{p}{\hbar})x} dx - \int_0^{\pi/\alpha} e^{-i(\alpha + \frac{p}{\hbar})x} dx \Big] \\
&= \frac{C}{2i\sqrt{2\pi\hbar}} \Big[\frac{1}{i(\alpha - \frac{p}{\hbar})} e^{i(\alpha - \frac{p}{\hbar})x} \Big|_0^{\pi/\alpha} + \frac{1}{i(\alpha + \frac{p}{\hbar})} e^{-i(\alpha + \frac{p}{\hbar})x} \Big|_0^{\pi/\alpha} \Big] \\
&= \frac{C}{2i\sqrt{2\pi\hbar}} \Big[\frac{e^{i\pi} e^{-ip\pi/\hbar\alpha} - 1}{i(\alpha - \frac{p}{\hbar})} + \frac{e^{-i\pi} e^{-ip\pi/\hbar\alpha} - 1}{i(\alpha + \frac{p}{\hbar})} \Big] \\
&= \frac{-C(e^{-ip\pi/\hbar\alpha} + 1)}{2i^2\sqrt{2\pi\hbar}} \Big[\frac{1}{(\alpha - \frac{p}{\hbar})} + \frac{1}{(\alpha + \frac{p}{\hbar})} \Big] \\
&= \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\alpha}{\alpha^2 - \frac{p^2}{\hbar^2}} (e^{-ip\pi/\hbar\alpha} + 1).
\end{aligned} \tag{3.136}$$

Преостаје нам још да нађемо константу C из услова нормирања таласне функције $\psi(x)$

$$\begin{aligned}
1 = \langle\psi|\psi\rangle &= \int_0^{\pi/\alpha} \psi^2(x) dx = \int_0^{\pi/\alpha} |C|^2 \sin^2(\alpha x) dx = \frac{|C|^2}{2} \int_0^{\pi/\alpha} (1 + \underbrace{\cos 2\alpha x) dx}_{0} \\
&= \frac{|C|^2 \pi}{2\alpha}.
\end{aligned} \tag{3.137}$$

Одавде добијамо $C = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}$ и када је убацимо у једначину (3.136) добијамо решење задатка.

3.3 Релације неодређености

1. Нормирањем таласне функције

$$\begin{aligned} 1 &= \langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|I|\psi\rangle \int_{-\infty}^{\infty} \langle\psi|x\rangle\langle x|\psi\rangle dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}} dx \\ &= |C|^2 \sqrt{a^2\pi}, \end{aligned} \tag{3.138}$$

налазимо коефицијент нормирања,

$$C = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}. \tag{3.139}$$

Средња вредност оператора $\hat{x}$ у стању $|\psi\rangle$ је

$$\langle x\rangle_{|\psi\rangle} = \langle\psi|x|\psi\rangle = \langle\psi|IxI|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dx dx' \langle\psi|x'\rangle\langle x'|\hat{x}|x\rangle\langle x|\psi\rangle. \tag{3.140}$$

Како је матрични елемент $\langle x'|\hat{x}|x\rangle = x\delta(x-x')$, средња вредност оператора $\hat{x}$ у било ком стању $|\psi\rangle$ је

$$\langle\hat{x}\rangle_{|\psi\rangle} = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dx dx' \psi^*(x') x \delta(x-x')\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 x. \tag{3.141}$$

Конкретно, за дату таласну функцију $\psi(x)$, средња вредност постаје

$$\begin{aligned} \langle\hat{x}\rangle_{|\psi\rangle} &= \underbrace{|C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}} dx}_{\text{Смена } t = x - x_0} = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} (t+x_0) e^{-\frac{t^2}{a^2}} dt \\ &= \underbrace{|C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} t e^{-\frac{t^2}{a^2}} dt}_{=0} + |C|^2 x_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{t^2}{a^2}} dt \\ &= |C|^2 x_0 a\sqrt{\pi} = x_0. \end{aligned} \tag{3.142}$$

Слицно, користећи матрични елемент $\langle x'|\hat{x^2}|x\rangle = x^2\delta(x-x')$ налазимо

$$\begin{aligned} \langle\hat{x}^2\rangle_{|\psi\rangle} &= \langle\psi|\hat{x}^2|\psi\rangle = \langle\psi|I\hat{x}^2 I|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dx dx' \langle\psi|x'\rangle\langle x'|\hat{x}^2|x\rangle\langle x|\psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dx dx' \psi^*(x') x^2 \delta(x-x')\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 x^2. \end{aligned} \tag{3.143}$$

Сада када имамо општи израз за средњу вредност оператора $\hat{x}$, можемо да уврстимо конкретну таласну функцију и добијемо

$$\begin{aligned} \langle\hat{x}^2\rangle_{|\psi\rangle} &= \underbrace{|C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}} dx}_{\text{Смена } t = x - x_0} = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} (t+x_0)^2 e^{-\frac{t^2}{a^2}} dt \\ &= |C|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} t^2 e^{-\frac{t^2}{a^2}} dt}_{=I} + \underbrace{|C|^2 2x_0 \int_{-\infty}^{\infty} t e^{-\frac{t^2}{a^2}} dt}_{=0} + |C|^2 x_0^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{t^2}{a^2}} dt}_{=a\sqrt{\pi}} \\ &= |C|^2 I + x_0^2. \end{aligned} \tag{3.144}$$

Преостаје нам још да израчунамо интеграл I

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} t^2 e^{-\frac{t^2}{a^2}} dt = 2\underbrace{\int_0^{\infty} t^2 e^{-\frac{t^2}{a^2}} dt}_{\text{Смена } u=t^2/a^2} = a^3 \underbrace{\int_0^{\infty} u^{\frac{1}{2}} e^{-u} du}_{\text{Гама ф-ја}} = a^3\Gamma(\frac{3}{2}) = a^3\frac{1}{2}\Gamma(\frac{1}{2}) \\ &= a^3\frac{1}{2}\sqrt{\pi}. \end{aligned} \tag{3.145}$$

Коначно,

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_{|\psi\rangle} = x_0^2 + \frac{a^2}{2}, \tag{3.146}$$

тако да је неодређеност координате

$$\Delta\hat{x} = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle_{|\psi\rangle} - \langle \hat{x} \rangle_{|\psi\rangle}^2} = \sqrt{x_0^2 + \frac{a^2}{2} - x_0^2} = \frac{a}{\sqrt{2}}. \tag{3.147}$$

Средња вредност импулса у стању $|\psi\rangle$ је

$$\langle \hat{p} \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi|\hat{p}|\psi\rangle = \langle \psi|I\hat{p}I|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdx' \langle\psi|x'\rangle\langle x'|\hat{p}|x\rangle\langle x|\psi\rangle. \tag{3.148}$$

Како је матрични елемент $\langle x'|\hat{p}|x\rangle = -i\hbar\delta'(x-x')$, општи израз за средњу вредност оператора $\hat{p}$ постаје

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle_{|\psi\rangle} &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdx' \psi^*(x') - i\hbar\delta'(x-x')\psi(x) \\ &= -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} dx[\int_{-\infty}^{\infty} dx'\psi^*(x')\frac{d}{dx'}\delta(x-x')]|\psi(x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\psi^*(x)\Big(-i\hbar\frac{d}{dx}\Big)\psi(x). \end{aligned} \tag{3.149}$$

За нашу таласну функцију, средња вредност импулса је једнака

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle_{|\psi\rangle} &= |C|^2\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{(-i\frac{p_0}{\hbar}x - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2})}(-i\hbar)\Big[i\frac{p_0}{\hbar} - \frac{x-x_0}{a^2}\Big] e^{(i\frac{p_0}{\hbar}x - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2})} \\ &= \underbrace{-i\hbar|C|^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\Big[i\frac{p_0}{\hbar} - \frac{x-x_0}{a^2}\Big] e^{-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}}}_{\text{Смена } t=x-x_0} \\ &= |C|^2 p_0 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{t^2}{a^2}}}_{=a\sqrt{\pi}} + \frac{i\hbar}{a^2}|C|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dt t e^{-\frac{t^2}{a^2}}}_{=0} \\ &= p_0. \end{aligned} \tag{3.150}$$

Слично се може показати да је средња вредност оператора $\hat{p}^2$ у произвољном стању $|\psi\rangle$ једнака

$$\langle \hat{p}^2 \rangle_{|\psi\rangle} = \int_{-\infty}^{\infty} dx|-i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x)|^2 \tag{3.151}$$

Када уврстимо таласну функцију у претходну једначину, добијамо

$$\begin{aligned}
\langle\hat{p}^2\rangle_{|\psi\rangle} &= |C|^2\hbar^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx\Big[\frac{p_0^2}{\hbar^2}+\frac{(x-x_0)^2}{a^4}\Big]e^{-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}}}_{\text{Смена } t=x-x_0} \\
&= |C|^2p_0^2\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dte^{-\frac{t^2}{a^2}}}_{=a\sqrt{\pi}} + \frac{|C|^2\hbar^2}{a^4}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dt\, t^2e^{-\frac{t^2}{a^2}}}_{=a^3\frac{1}{2}\sqrt{\pi}} \\
&= p_0^2+\frac{\hbar^2}{2a^2}. \qquad (3.152)
\end{aligned}$$

Неодређеност импулса је

$$\Delta\hat{p}=\sqrt{\langle\hat{p}^2\rangle_{|\psi\rangle}-\langle\hat{p}\rangle^2_{|\psi\rangle}}=\sqrt{p_0^2+\frac{\hbar^2}{2a^2}-p_0^2}=\frac{\hbar}{a\sqrt{2}}. \qquad (3.153)$$

Производ неодређености координате и импулса је онда

$$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}=\frac{\hbar}{2} \qquad (3.154)$$

тако да је ова таласна функција (Гаусов пакет) стање са минималном неодређеношћу.

2. Нормираћемо таласну функцију ψ,

$$1=\langle\psi|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2dx=|C|^2\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^2(x)dx. \qquad (3.155)$$

Средња вредност импулса је

$$\begin{aligned}
\langle\hat{p}\rangle_{|\psi\rangle} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\psi^*(x)\Big(-i\hbar\frac{d}{dx}\Big)\psi(x)=|C|^2(-i\hbar)\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{p_0}{\hbar}x}\varphi(x)\frac{d}{dx}e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}\varphi(x) \\
&= |C|^2(-i\hbar)\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)[i\frac{p_0}{\hbar}\varphi(x)+\varphi'(x)]dx \\
&= p_0\underbrace{|C|^2\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^2(x)dx}_{=1} - i\hbar|C|^2\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\varphi'(x)dx}_{=K} \\
&= p_0-i\hbar|C|^2K. \qquad (3.156)
\end{aligned}$$

Вредност интеграла K је

$$K=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\varphi'(x)dx=\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^2(x)dx=\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\frac{1}{|C|^2}=0, \qquad (3.157)$$

јер је C константа, тако да је средња вредност импулса

$$\langle\hat{p}\rangle_{|\psi\rangle}=p_0. \qquad (3.158)$$

3. Уколико претпоставимо

$$\Delta x \sim x \text{ и } \Delta p \sim p, \tag{3.159}$$

Хајзенбергову релацију неодређености можемо да напишемо у форми

$$xp \sim \hbar \Rightarrow p \sim \frac{\hbar}{x}. \tag{3.160}$$

Користећи ове релације, енергију можемо да напишемо као

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx2}{2} \sim \frac{\hbar^2}{2mx^2} + \frac{kx^2}{2}. \tag{3.161}$$

Минимум енергије налазимо из услова

$$\frac{dE}{dx} = 0 \Rightarrow x_{min} = (\frac{\hbar^2}{km})^{\frac{1}{4}}, \tag{3.162}$$

тако да је минимална енергија тј. енергија основног стања приближно

$$E_{min} \sim \hbar\omega, \tag{3.163}$$

где је $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

4. Енергија везе електрона је једнака

$$E_v = |U(r)| - T = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r} - \frac{p^2}{2m}. \tag{3.164}$$

Претпоставићемо да важи

$$\Delta r \sim r \text{ и } \Delta p \sim p. \tag{3.165}$$

Хајзенбергова релацију неодређености постаје

$$xp \sim \hbar \Rightarrow p \sim \frac{\hbar}{x}. \tag{3.166}$$

Равнотежни положај налазимо из услова

$$\frac{dE_v}{dr} = 0 \Rightarrow r_{osn} = \frac{\hbar^2}{me^2}4\pi\epsilon_0 \approx 0,053nm. \tag{3.167}$$

Ово је Боров радијус основног стања. Енергија везе у основном стању

$$E_{v\ osnovno} = \frac{1}{(4\pi\epsilon)^2}\frac{me^4}{2\hbar^2} \approx 13,6eV \tag{3.168}$$

се поклапа се вредношћу која се добија из Борове теорије.

3.4 Динамика

1. Шредингерова једначина и њој конјугована једначина су

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi, \tag{3.169}$$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial x} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* + V\psi^*. \tag{3.170}$$

Ако од прве једначине помножене таласном функцијом ψ^* са десне стране одузмемо другу једначину помножену таласном функцијом ψ са леве стране, добићемо

$$i\hbar\Big(\frac{\partial\psi}{\partial x}\psi^* + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\Big) = \frac{\hbar^2}{2m}\Big(\Delta\psi\psi^* - \psi\Delta\psi^*\Big). \tag{3.171}$$

Увођењем величина

$$\rho = \psi\psi^* \text{ и } \boldsymbol{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\nabla\psi\psi^* - \psi\nabla\psi^*), \tag{3.172}$$

једначина (3.171) се може написати у форми

$$\frac{\partial\rho}{\partial x} + div\boldsymbol{j} = 0, \tag{3.173}$$

што представља једначину континуитета.

2. Својствена функција оператора импулса у координатној репрезентацији $\langle x|p\rangle$ је

$$\langle x|p\rangle = p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{p}{\hbar}x}. \tag{3.174}$$

Ову релацију смо показали у задатку 2.24. За $p > 0$ имамо раван талас који пропагира у смеру пораста x осе, за $p < 0$ имамо раван талас који пропагира супротно од смера пораста x осе. Аналогно, у три димензије, својствена функција оператора импулса у координатној репрезентацији је

$$\langle \boldsymbol{r}|p\rangle = p(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{\boldsymbol{r}\boldsymbol{p}}{\hbar}}. \tag{3.175}$$

Хамилтонијалан слободне честице у једној димензији је

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m}. \tag{3.176}$$

Како је $[H,\hat{p}] = 0$, то нам говори да Хамилтонијан и оператор импулса имају заједнички својствени базис, а то су таласне функције $p(x)$. Заменом ове таласне функције у временски независну Шредингерову једначину у координатној репрезентацији

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}p(x) = Ep(x) \Rightarrow \frac{p^2}{2m}p(x) = Ep(x), \tag{3.177}$$

добијамо енергију слободне честице у једној димензији

$$E = \frac{p^2}{2m} > 0. \tag{3.178}$$

Хамилтонијан слободне честице у три димензије је

$$H = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}. \tag{3.179}$$

Из чињенице да је $[H, \hat{\boldsymbol{p}}] = 0$, закључујемо да Хамилтонијан и оператор импулса имају заједнички својствени базис, у координатној репрезентацији он је $p(\boldsymbol{r})$. Сада временски независна Шредингерова једначина изгледа као

$$\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} p(\boldsymbol{r}) = Ep(\boldsymbol{r}) \Rightarrow \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} p(\boldsymbol{r}) = Ep(\boldsymbol{r}). \tag{3.180}$$

Енергија слободне честице у три димензије је онда

$$E = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} > 0. \tag{3.181}$$

3. Временски независна Шредингерова једначина честице која се креће у потенцијалу $V(x)$ је

$$\Big(- \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \Big) \psi(x) = E\psi(x). \tag{3.182}$$

Таласна функција не постоји ван интервала $(0, a)$: када би постојала, енергија честице у тим областима би била бесконачна, што је немогуће, тако да разматрамо само област $(0, a)$. У овој области се честица креће слободно и има смисла разматрати само енергије $E > 0$. Шредингерова једначина има облик

$$\Big(- \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Big) \psi(x) = E\psi(x) \Rightarrow \psi'' + k^2 \psi = 0, \tag{3.183}$$

где је $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Својствена функција Хамилтонијана је [2]

$$\psi(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} = A \sin kx + B \cos kx. \tag{3.184}$$

Гранични услови $\psi(0) = \psi(a) = 0$ нам дају

$$B = 0 \text{ и } A \sin ka = 0. \tag{3.185}$$

Други гранични услов нам каже да мора бити[3]

$$\sin ka = 0 \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a} n = 1, 2, 3..., \tag{3.186}$$

[2]Ако имате локализовану честицу у некој области чија су својствене функције равни таласи, пожељно је написати решење једначине у базису sin и cos јер они представљају реална физичка стања, док равни таласи то нису.

[3]Када бисмо узели $A = 0$, таласна функција би била једнака нули и $\psi = 0$

тако да су својствене енергије квантоване и износе

$$E_n = \frac{(\frac{n\pi}{a})^2\hbar^2}{2m}. \tag{3.187}$$

Нормирањем таласне функције на јединицу налазимо коефицијент A

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = \int_0^{\pi/a} |\psi_n|^2 dx = |A|^2 \int_0^{\pi/a} sin^2\frac{n\pi}{a}xdx = |A|^2\frac{a}{2} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}. \tag{3.188}$$

Закључујемо да су својствене функције и енергије, редом

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x, \ \ E_n = \frac{(\frac{n\pi}{a})^2\hbar^2}{2m}, \ n = 1, 2, 3, ... \tag{3.189}$$

Својствене функције су међусобно ортогоналне, тј. важи релација

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \int_0^a \psi_n^*(x)\psi_m(x)dx = \delta_{nm}. \tag{3.190}$$

4. Ако је честица у почетном тренутку била у стању $\psi(x, 0)$, то стање можемо написати у базису својствених функција на следећи начин

$$\psi(x, 0) = \sum_n a_n\psi_n(x). \tag{3.191}$$

Коефицијенти a_n су непознати и њих треба одредити. Из услова

$$\begin{aligned} 1 &= \langle\psi|\psi\rangle = \int \psi^*(x,0)\psi(x,0)dx = \int_0^a dx \sum_n a_n^*\psi_n(x)a_m\psi_m(x) \\ &= \sum_{n,m} a_n^* a_m \underbrace{\int dx\psi_n^*(x)\psi_m(x)}_{=\delta_{nm}} = \sum_{n,m} a_n^* a_m\delta_{nm} = \sum_n |a_n|^2, \end{aligned} \tag{3.192}$$

схватамо да сума квадрата свих коефицијената мора бити једнака јединици. Следеће што бисмо волели да знамо су коефицијенти a_n. Скаларни производ

$$\begin{aligned} \langle\psi_m|\psi(t=0)\rangle &= \int dx\psi_m^*\psi(x, t=0) = \int dx\psi_m^* \sum_n a_n\psi_n = \sum_n a_n \underbrace{\int \psi_m^*\psi_n dx}_{\delta_{nm}} \\ &= \sum_n a_n\delta_{nm} = a_m, \end{aligned} \tag{3.193}$$

нам даје коефицијент који одговара својственој функцији $\psi_m(x)$. Сада када знамо све коефицијенте, својствене функције и својствене енергије можемо написати једначину за еволуцију стања

$$\psi(x,t) = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(x). \tag{3.194}$$

Конкретно, у овом задатку имамо честицу у БДП јами, тако да су својствене таласне функције и својствене енергије, редом

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x, \quad E_n = \frac{(\frac{n\pi}{a})^2\hbar^2}{2m}, \; n = 1, 2, 3, ... \tag{3.195}$$

Нормирањем таласне функције налазимо константу нормирања A,

$$\begin{aligned} 1 &= \langle\psi|\psi\rangle = \int_0^a |\psi(x, t=0)|^2 dx = \int_0^a |A|^2 x^2 (a-x)^2 dx = |A|^2\frac{a^5}{30} \\ &\Rightarrow \; A = \sqrt{\frac{30}{a^5}}. \end{aligned} \tag{3.196}$$

Оно што нам преостаје да нађемо су коефицијенти a_n,

$$\begin{aligned} a_n &= \langle\psi_n|\psi\rangle = \int_0^a dx\psi_n^*(x)\psi(x, t=0) = |A|\int_0^a dx\, x(a-x)\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x \\ &= |A|\sqrt{\frac{2}{a}}\Big[a\underbrace{\int_0^a dx\, x\sin\frac{n\pi}{a}x}_{I_1} - \underbrace{\int_0^a dx\, x^2\sin\frac{n\pi}{a}x}_{I_2}\Big]. \end{aligned} \tag{3.197}$$

Интеграл I_1 решавамо парцијалном интеграцијом, сменом $u = x$, $dv = \sin\frac{n\pi}{a}x$,

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^a dx\, x\sin\frac{n\pi}{a}x = -\frac{a}{n\pi}x\cos\frac{n\pi}{a}x\Big|_0^a + \frac{a}{n\pi}\int_0^a \cos\frac{n\pi}{a}xdx \\ &= -\frac{a^2}{n\pi}(-1)^n + \frac{a^2}{n^2\pi^2}\underbrace{\sin\frac{n\pi}{a}x\Big|_0^a}_{=0} \\ &= -\frac{a^2}{n\pi}(-1)^n. \end{aligned} \tag{3.198}$$

Интеграл I_2 се решава на сличан начин,

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_0^a dx\, x^2\sin\frac{n\pi}{a}x = -\frac{a}{n\pi}x^2\cos\frac{n\pi}{a}x\Big|_0^a + \frac{2a}{n\pi}\int_0^a dx\, x\cos\frac{n\pi}{a}x \\ &= -\frac{a^3}{n\pi}(-1)^n + \frac{2a}{n\pi}\Big[\underbrace{\frac{a}{n\pi}\sin\frac{n\pi}{a}x\, x\Big|_0^a}_{=0} - \frac{a}{n\pi}\int_0^a dx\sin\frac{n\pi}{a}x\Big] \\ &= -\frac{a^3}{n\pi}(-1)^n + \frac{2a^3}{n^3\pi^3}\cos\frac{n\pi}{a}x\Big|_0^a \\ &= -\frac{a^3}{n\pi}(-1)^n + \frac{2a^3}{n^3\pi^3}((-1)^m - 1). \end{aligned} \tag{3.199}$$

Сада је коефицијент a_n једнак

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{\sqrt{60}}{a^3}\Big(\underbrace{-\frac{a^3}{n\pi}(-1)^n + \frac{a^3}{n\pi}(-1)^n}_{=0} - \frac{2a^3}{n^3\pi^3}((-1)^m - 1)\Big) \\ &= \frac{\sqrt{60}}{n^3\pi^3}(1 - (-1)^n). \end{aligned} \tag{3.200}$$

Ако је $n = 2k$ парно, коефицијенти су једнаки нули, док су непарни коефицијенти a_{2k+1} различити од нуле.

$$a_{2k} = 0, \qquad a_{2k+1} = \frac{4\sqrt{60}}{(2k+1)^3\pi^3}. \tag{3.201}$$

Таласна функција у произвољном тренутку времена је једнака

$$\psi(x,t) = \sum_{k=0}^{\infty} 8\sqrt{15}\frac{1}{(2k+1)^3\pi^3} e^{-\frac{i}{\hbar}E_{2k+1}t}\psi_{2k+1}(x). \tag{3.202}$$

5. Како је

$$\sin^3\frac{\pi}{a}x = \frac{3}{4}\sin\frac{\pi}{a}x - \frac{1}{4}\sin\frac{3\pi}{a}x \tag{3.203}$$

и

$$\sin\frac{\pi}{a}x = \sqrt{\frac{a}{2}}\psi_1(x), \quad \sin\frac{3\pi}{a}x = \sqrt{\frac{a}{2}}\psi_3(x), \tag{3.204}$$

таласна функција изражена преко својствених функција има облик

$$\psi(x,t=0) = \underbrace{\frac{3}{4}A\sqrt{\frac{a}{2}}}_{c_1}\psi_1(x) - \underbrace{\frac{A}{4}\sqrt{\frac{a}{2}}}_{c_3}\psi_3(x). \tag{3.205}$$

Сума квадарата свих коефицијената је једнака 1,

$$1 = |c_1|^2 + |c_3|^2 = \frac{9}{16}A^2\frac{a}{2} + \frac{1}{16}A^2\frac{a}{2} \Rightarrow A = \frac{4}{\sqrt{5a}}, \tag{3.206}$$

па је нормирана почетна таласна функција

$$\psi(x,t=0) = \frac{3}{\sqrt{10}}\psi_1(x) - \frac{1}{\sqrt{10}}\psi_3(x), \tag{3.207}$$

док ја таласна функција у произвољном тренутку

$$\psi(x,t) = \frac{3}{\sqrt{10}}\psi_1(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} - \frac{1}{\sqrt{10}}\psi_3(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_3 t}. \tag{3.208}$$

6. *КОНАЧАН СКОК ПОТЕНЦИЈАЛА*

Ако је коначан скок потенцијала у тачки a, интеграцијом Шредингерове једначине у интервалу $(a-\epsilon, a+\epsilon)$, имамо

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\psi'(a+\epsilon) - \psi'(a-\epsilon)] + \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} V(x)\psi(x)dx = E\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\psi(x)dx. \tag{3.209}$$

По теореми о средњој вредности, за неку вредност променљиве x, интеграл $\int_a^b f(x)dx$ је једнак $\int_a^b f(x)dx = f(\epsilon_1)(a-b)$. Ако применимо ову теорему, једначина (3.209) добија облик

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\psi'(a+\epsilon) - \psi'(a-\epsilon)] + 2\epsilon V(m_1)\psi(m_1) = 2E\epsilon\,\psi(m_2). \tag{3.210}$$

У лимесу малих ϵ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{\epsilon\to 0}[\psi'(a+\epsilon)-\psi'(a-\epsilon)]+\lim_{\epsilon\to 0}2\epsilon V(m_1)\psi(m_1)=\lim_{\epsilon\to 0}2E\epsilon\,\psi(m_2), \quad (3.211)$$

добијамо

$$\psi'(a+)=\psi'(a-), \quad (3.212)$$

што нам говори да нема прекида извода таласне функције у тачки коначног скока потенцијала.

БЕСКОНАЧАН СКОК ПОТЕНЦИЈАЛА $V=\alpha\delta(x-a)$

Интеграција Шредингерове једначине добијамо

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\psi'(a+\epsilon)-\psi'(a-\epsilon)]+\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\alpha\delta(x-a)\psi(x)dx=E\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\psi(x)dx. \quad (3.213)$$

Примена теореме о средњој вредности нам даје

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\psi'(a+\epsilon)-\psi'(a-\epsilon)]+\alpha\psi(a)=E\psi(m_2)2\epsilon. \quad (3.214)$$

У лимесу малих ϵ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{\epsilon\to 0}[\psi'(a+\epsilon)-\psi'(a-\epsilon)]+\lim_{\epsilon\to 0}\psi(a)\alpha=\lim_{\epsilon\to 0}2E\epsilon\,\psi(m_2), \quad (3.215)$$

добијамо

$$\psi'(a+)-\psi'(a-)=\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(a). \quad (3.216)$$

Ова једначина нам каже да постоји прекид извода таласне функције у тачки бесконачног скока потенцијала и да је једнак $\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(a)$.

7. Претпоставимо супротно, да постоје две таласне функције $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ које се разликују за више од фазног фактора и својствене су функције датог Хамилтонијана $H=T+V(x)$ за исту својствену вредност E,

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+V(x)\psi_1(x) &= E\psi_1(x), \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+V(x)\psi_2(x) &= E\psi_2(x). \end{aligned} \quad (3.217)$$

Уколико обе једначине помножимо слева, прву једначину са $\psi_2(x)$ а другу са $\psi_1(x)$, и потом их одузмемо, добијамо

$$\psi_2(x)\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}-\psi_1(x)\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}=\frac{d}{dx}(\psi_2(x)\frac{d\psi_1(x)}{dx}-\psi_1(x)\frac{d\psi_2(x)}{dx})=0. \quad (3.218)$$

Сада можемо да закључимо да мора да важи

$$\psi_2(x)\frac{d\psi_1(x)}{dx}-\psi_1(x)\frac{d\psi_2(x)}{dx}=const. \quad (3.219)$$

Уколико можемо да нађемо бар једну тачку у којој су и ψ_1 и ψ_2 једнаки 0, онда ће израз (3.219) бити једнак 0 за свако x. Ово мора да важи за везана стања јер су она квадратно интеграбилне функције. Код слободних стања, дегенерација *може* да постоји. Трансформисаћемо једначину (3.219) користећи да је $const = 0$ за везана стања,

$$\frac{\psi_1'(x)}{\psi_1(x)} = \frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)}. \tag{3.220}$$

Интеграцијом добијамо,

$$\ln\psi_1(x) = \ln\psi_2(x) + \ln C \Rightarrow \psi_1(x) = C\psi_2(x). \tag{3.221}$$

Како су обе функције нормиране, $C = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$, тј. функције $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ представљају исто стање, што је у супротности са нашом претпоставком.

8. По услову задатка је потенцијал парна функција, $V(x) = V(-x)$. Шредингерову једначину можемо написати као

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{3.222}$$

Уколико направимо смену, $x \to -x$, и искористимо услов задатка, добијамо

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(-x)}{dx^2} + V(x)\psi(-x) = E\psi(-x). \tag{3.223}$$

Поређењем претходне две једначине видимо да су $\psi(x)$ и $\psi(-x)$ решења исте Шредингерове једначине, тј. мора да важи $\psi(x) = C\psi(-x)$, где је C нека константа нормирана на 1. Дефинисаћемо оператор парности као

$$(P\psi)(x) = \psi(-x), \quad \psi \in L^2(R). \tag{3.224}$$

Може се показати да су својствене вектори овог оператора парне и непарне функције, за својствене вредности 1 и -1, респективно. Како Хамилтонијан $H = T + V(x)$ комутира са оператором парности P,

$$[P, H] = 0, \tag{3.225}$$

закључујемо да својствена стања Хамилтонијана морају да буду тачно одређене парности, тј.

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \psi(-x), \\ \psi(x) &= -\psi(-x). \end{aligned} \tag{3.226}$$

9. *I ОБЛАСТ*

Шредингерова једначина у овој области нам даје

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi \Rightarrow \psi'' + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=k_1^2>0}\psi = 0 \Rightarrow \psi_I = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x}. \tag{3.227}$$

II ОБЛАСТ

Шредингерова једначина у овој области је

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''+V\psi = E\psi \Rightarrow \psi''+\underbrace{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}}_{=k_2^2>0}\psi = 0 \Rightarrow \psi_{II} = C_3e^{ik_2x}+C_4e^{-ik_2x}. \quad (3.228)$$

Сетимо се да раван талас e^{ikx} представља раван талас који се креће у правцу и смеру x осе, док e^{-ikx} предтавља раван талас који се креће супротно од смера x осе. Ако погледамо решења једначине, видимо да уз коефицијент C_1 стоји раван талас који је кренуо из $-\infty$ и креће се у правцу и смеру x осе, док уз коефицијент C_2 стоји рефлектовани талас који се у $x = 0$ одбио од баријере и враћа у $-\infty$. Уз коефицијент C_3 стоји раван талас који се трансмитовао(прошао) кроз потенцијалну баријеру и креће се ка ∞. Уз коефицијент C_4 је раван талас који креће из ∞ и креће се ка $-\infty$, али то нема смисла јер смо честицу пустили са лева на десно, а не са десна на лево, и закључујемо да мора бити $C_4 = 0$. Како је скок потенцијала коначан, знамо да ни таласна функција ни извод таласне функције не трпе скок у тачки коначног скока потенцијала

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0), \qquad \psi_I'(0) = \psi_{II}'(0). \quad (3.229)$$

Заменом таласних функција и извода у тачки $x = 0$ налазимо везу коефицијената

$$C_1 + C_2 = C_3, \qquad C_1 - C_2 = \frac{k_2}{k_1}C_3. \quad (3.230)$$

Ако све коефицијенте изразимо помоћу C_3, добијамо

$$C_1 = \frac{1}{2}(1+\frac{k_2}{k_1})C_3, \quad C_2 = \frac{1}{2}(1-\frac{k_2}{k_1})C_3. \quad (3.231)$$

Сада ћемо увести нове величине. Иницијална струја вероватноће је

$$j_{in} = \frac{\hbar}{2mi}(\nabla\psi_{in}\psi_{in}^* - \psi_{in}\nabla\psi_{in}^*). \quad (3.232)$$

За $\psi_{in} = C_1e^{ikx} \Rightarrow$

$$j_{in} = \frac{\hbar}{2mi}(ik_1C_1e^{ik_1x}C_1^*e^{-ik_1x} - C_1e^{ik_1x}(-ik_1)C_1^*e^{-ik_1x}) = \frac{\hbar k_1}{m}|C_1|^2. \quad (3.233)$$

Слично, рефлектована струја вероватноће је дефинисана као

$$j_{ref} = \frac{\hbar}{2mi}(\nabla\psi_{ref}\psi_{ref}^* - \psi_{ref}\nabla\psi_{ref}^*). \quad (3.234)$$

За $\psi_{ref} = C_2e^{-ik_1x}$ је

$$j_{ref} = \frac{\hbar}{2mi}(-ik_1C_2e^{-ik_1x}C_2^*e^{ik_1x} - C_2e^{ik_1x}(+i\hbar)C_2^*e^{+ik_1x}) = -\frac{\hbar k_1}{m}|C_2|^2. \quad (3.235)$$

Сличо дефинишемо и трансмитовану струју вероватноће,

$$j_t = \frac{\hbar}{2mi}(\nabla\psi_t\psi_t^* - \psi_t\nabla\psi_t^*). \tag{3.236}$$

За $\psi_t = C_3 e^{ik_2x}$ добијамо

$$j_t = \frac{\hbar}{2mi}(ik_2C_3e^{ik_2x}C_3^*e^{-ik_2x} - C_3e^{ik_2x}(-i\hbar)C_3^*e^{-ik_2x}) = \frac{\hbar k_2}{m}|C_3|^2. \tag{3.237}$$

Сада можемо да дефинишемо коефицијенте рефлексије и трансмисије

$$R = \frac{|j_r|}{|j_{in}|}, \qquad T = \frac{|j_t|}{|j_{in}|}. \tag{3.238}$$

Они у нашем задатку износе

$$R = \frac{|C_2|^2}{|C_1|^2}, \qquad T = \frac{|C_3|^2}{|C_1|^2}, \tag{3.239}$$

и заменом коефицијената из једначине (3.231) у последњу једначину добијамо

$$R = \frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}, \qquad T = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}. \tag{3.240}$$

Лако се проверава да важи

$$R + T = 1. \tag{3.241}$$

10. Минимум потенцијалне енергије честице у овом задатку је $-\infty$. Како знамо да укупна енергија честице мора бити већа од минимума потенцијалне енергије, следи да укупна енергија може узимати произвољну вредност. Разнатраћемо посебно случајеве позитивне и негативне енергије честице.

    1. СЛУЧАЈ $E > 0$

    - *I област*

      Шредингерова једначина у овој области је

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_I'' = E\psi_I \Rightarrow \psi_I'' + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=k^2>0}\psi_I = 0 \Rightarrow \psi_I = C_1e^{ikx} + C_2e^{-ikx}. \tag{3.242}$$

    - *II област*

      ШЈ изгледа као

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{II}'' = E\psi_{II} \Rightarrow \psi_{II}'' + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=k^2>0}\psi_{II} = 0 \Rightarrow \psi_{II} = C_3e^{ikx} + \underbrace{C_4e^{-ikx}}_{C_4=0}. \tag{3.243}$$

      Коефицијент $C_4 = 0$, јер честица наилази са лева на потенцијалну баријеру а не са десна.

Скок потенцијала је бесконачан, тако да су гранични услови,[4]

$$\psi_I(0-) = \psi_{II}(0+), \qquad \psi'_{II}(0+) - \psi'_I(0-) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi_I(0). \tag{3.244}$$

Гранични услови нам дају везу коефицијената

$$C_1 + C_2 = C_3, \qquad ikC_3 - ik(C_1 - C_2) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}C_3. \tag{3.245}$$

Све коефицијенте ћемо изразити помоћу C_3.

$$C_2 = i\frac{m\alpha}{k\hbar}C_3 \qquad C_1 = (1 - i\frac{m\alpha}{k\hbar})C_3. \tag{3.246}$$

Знајући ове коефицијенте можемо наћи коефицијенте R и T.

$$R = \frac{|C_2|^2}{|C_1|^2} = \frac{\frac{m^2\alpha^2}{k^2\hbar^2}}{1 + \frac{m^2\alpha^2}{k^2\hbar^2}} \qquad T = \frac{|C_3|^2}{|C_1|^2} = \frac{1}{1 + \frac{m^2\alpha^2}{k^2\hbar^2}}. \tag{3.247}$$

Очигледно је да и у овом случају важи

$$R + T = 1. \tag{3.248}$$

Можда се неко запитао, а шта је са енергетским нивоима за $E > 0$? Приметимо да не постоји никакав услов на параметар k који у себи садржи енергију, па се може закључити да енергија узима произвољну вредност. Дакле, енергија је континуална или, другачије речено, енергија није квантована.

2. СЛУЧАЈ $E = -|E| < 0$

- *I област*

  ШЈ у овој области је

  $$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_I = -|E|\psi_I \Rightarrow \psi''_I - \underbrace{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}_{=\kappa^2>0}\psi_I = 0 \Rightarrow \psi_I = C_1e^{\kappa x} + \underbrace{C_2e^{-\kappa x}}_{C_2=0}. \tag{3.249}$$

  Коефицијент C_2 мора бити једнак нули, иначе би таласна функција дивергирала у $-\infty$, тако да би вероватноћа да се честица нађе у $-\infty$ била $\psi_I^*(-\infty)\psi_I(-\infty) = \infty$, што је немогуће.[5]

- *II област*

  ШЈ изгледа као

  $$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_{II} = -|E|\psi_{II} \Rightarrow \psi''_{II} - \underbrace{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}_{=\kappa^2>0}\psi_{II} = 0 \Rightarrow \psi_{II} = C_3e^{-\kappa x} + \underbrace{C_4e^{\kappa x}}_{C_4=0}. \tag{3.250}$$

  Коефицијент $C_4 = 0$, иначе би таласна функција у ∞ дивергирала, и вероватноћа да се честица нађе у ∞ би дивергирала.

[4] Једначина (3.216) је дата за скок потенцијала $\alpha\delta(x-a)$, како је у овом задатку потенцијал $-\alpha\delta(0)$, израз са десне стране једначине (3.216) је $-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi_I(0)$.

[5] Вероватноћа да се честица нађе у интервалу $(-\infty, \infty)$ је једнака јединици.

Скок потенцијала је бесконачан, и гранични услови су

$$\psi_I(0-) = \psi_{II}(0+), \qquad \psi'_{II}(0+) - \psi'_I(0-) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi_I(0). \tag{3.251}$$

На основу граничих услова налазимо везу коефицијената,

$$C_1 = C_3 = C, \qquad -\kappa C_3 - \kappa C_1 = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}C_3, \tag{3.252}$$

и параметар κ,

$$\kappa = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \Rightarrow |E| = \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2} \Rightarrow E = -\frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2}. \tag{3.253}$$

Нормирањем таласне функције

$$\begin{aligned} 1 &= \langle\psi|\psi\rangle = |C|^2\int_{-\infty}^{0}|\psi_I(x)|^2dx + |C|^2\int_0^\infty |\psi_{II}(x)|^2dx = 2|C|^2\int_0^\infty e^{-2\kappa x}dx \\ &= 2|C|^2\frac{1}{-2\kappa}e^{-2\kappa x}\Big|_0^\infty = \frac{|C|^2}{\kappa}, \end{aligned} \tag{3.254}$$

налазимо коефицијент нормирања

$$C = \sqrt{\kappa}. \tag{3.255}$$

Таласна функција се може написати у компактном облику

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa}e^{-\kappa|x|}, \tag{3.256}$$

док је енергија квантована и може узимати само вредност

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}. \tag{3.257}$$

11. *1. СЛУЧАЈ* $E > 0$

- *I област*

  Шредингерова једначина у овој области је

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_I = E\psi_I \Rightarrow \psi''_I + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=k^2>0}\psi_I = 0 \Rightarrow \psi_I = C_1e^{ikx} + C_2e^{-ikx}. \tag{3.258}$$

- *II област*

  ШЈ изгледа као

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_{II} - V\psi_{II} = E\psi_{II} \Rightarrow \psi''_{II} + \underbrace{\frac{2m(E+V)}{\hbar^2}}_{=k_1^2>0}\psi_{II} = 0 \Rightarrow \tag{3.259}$$

$$\psi_{II} = C'_3e^{ik_1x} + C'_4e^{-ik_1x} = C_3\cos k_1x + C_4\sin k_1x. \tag{3.260}$$

Таласну функцију ψ пишемо у базису sin и cos кад год имамо честицу ограничену у неком делу простора.

- *III област*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_{III} = E\psi_{III} \Rightarrow \psi''_{III} + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=k^2>0}\psi_{III} = 0 \Rightarrow \psi_{III} = C_5 e^{ikx} + \underbrace{C_6 e^{-ikx}}_{C_6=0}. \tag{3.261}$$

Коефицијент $C_6 = 0$ јер честица наилази са лева на потенцијалну баријеру, док израз $C_6 e^{-ikx}$ представља честицу која са десна наилази на потенцијал, што је у супротности са поставком задатка.

Гранични услови

$$\begin{aligned} \psi_I(-a) &= \psi_{II}(-a), \\ \psi'_I(-a) &= \psi'_{II}(-a), \\ \psi_{II}(a) &= \psi_{III}(a), \\ \psi'_{II}(a) &= \psi'_{III}(a), \end{aligned} \tag{3.262}$$

нам дају систем једначина

$$\begin{aligned} C_1 e^{ika} + C_2 e^{-ika} &= C_3\cos k_1 a - C_4 \sin k_1 a, \\ ik(C_1 e^{ika} - C_2 e^{-ika}) &= k_1(C_3 \sin k_1 a + C_4 \cos k_1 a), \\ C_3 \cos k_1 a + C_4 \sin k_1 a &= C_5 e^{ika}, \\ k_1(-C_3 \sin k_1 a + C_4 \cos k_1 a) &= ikC_5 e^{ika}, \end{aligned} \tag{3.263}$$

који можемо да напишемо у матричној форми на следећи начин

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix}}_{\text{A}} \begin{pmatrix} C_1 e^{-ika} \\ C_2 e^{ika} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos k_1 a & \sin k_1 a \\ k_1 \sin k_1 a & k_1 \cos k_1 a \end{pmatrix}}_{B} \begin{pmatrix} C_3 \\ C_4 \end{pmatrix}, \tag{3.264}$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \cos k_1 a & \sin k_1 a \\ -k_1 \sin k_1 a & k_1 \cos k_1 a \end{pmatrix}}_{C} \begin{pmatrix} C_3 \\ C_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ ik \end{pmatrix} e^{ika} C_5. \tag{3.265}$$

На основу последње две једначине налазимо везу коефицијената

$$\begin{pmatrix} C_1 e^{-ika} \\ C_2 e^{ika} \end{pmatrix} = A^{-1}BC^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ ik \end{pmatrix} C_5 e^{ika}. \tag{3.266}$$

Матрице A^{-1} и C^{-1} су једнаке

$$A^{-1} = -\frac{1}{2ik}\begin{pmatrix} -ik & -1 \\ -ik & 1 \end{pmatrix}, \quad C^{-1} = \begin{pmatrix} k_1 \cos k_1 a & -\sin k_1 a \\ k_1 \sin k_1 a & \cos k_1 a \end{pmatrix}. \tag{3.267}$$

После мало рачуна, једначина (3.266) се може написати у форми

$$\begin{pmatrix} C_1 e^{-ika} \\ C_2 e^{ika} \end{pmatrix} = -\frac{1}{2ikk_1}\begin{pmatrix} -(k^2+k_1^2)\sin 2k_1 a - 2ikk_1 \cos 2k_1 a \\ (k_1^2 - k^2)\sin k_1 a \end{pmatrix} C_5 e^{ika}. \tag{3.268}$$

Коефицијенти рефлексије и трансмисије су

$$R = \frac{|C_2|^2}{|C_1|^2} = \frac{(k_1^2 - k^2)^2 \sin^2 k_1 a}{(k_1^2 + k^2)^2 \sin^2 k_1 a + 4k^2 k_1^2 \cos^2 2k_1 a}, \tag{3.269}$$

$$T = \frac{|C_5|^2}{|C_1|^2} = \frac{4k^2 k_1^2}{(k_1^2 + k^2)^2 \sin^2 k_1 a + 4k^2 k_1^2 \cos^2 2k_1 a}. \tag{3.270}$$

Може се проверити да важи $R + T = 1$.

2. СЛУЧАЈ $E = -|E| < 0$

- *I област*

  Шредингерова једначина у овој области је

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_I'' = -|E|\psi_I \Rightarrow \psi_I'' - \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=\kappa^2>0}\psi_I = 0 \Rightarrow \psi_I = \underbrace{C_1 e^{-\kappa x}}_{C_1=0} + C_2 e^{\kappa x}. \tag{3.271}$$

- *II област*

  ШЈ изгледа као

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{II}'' - V\psi_{II} = -|E|\psi_{II} \Rightarrow \psi_{II}'' + \underbrace{\frac{2m(V - |E|)}{\hbar^2}}_{=k^2>0}\psi_{II} = 0 \Rightarrow \tag{3.272}$$

$$\psi_{II} = C_3' e^{ikx} + C_4' e^{-ikx} = C_3 \sin kx + C_4 \cos kx. \tag{3.273}$$

- *III област*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{III}'' = E\psi_{III} \Rightarrow \psi_{III}'' - \underbrace{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}_{=\kappa^2>0}\psi_{III} = 0 \Rightarrow \psi_{III} = C_5 e^{-\kappa x} + \underbrace{C_6 e^{\kappa x}}_{C_6=0}. \tag{3.274}$$

Гранични услови

$$\begin{aligned} \psi_I(-a) &= \psi_{II}(-a), \\ \psi_I'(-a) &= \psi_{II}'(-a), \\ \psi_{II}(a) &= \psi_{III}(a), \\ \psi_{II}'(a) &= \psi_{III}'(a), \end{aligned} \tag{3.275}$$

нам дају систем једначина

$$C_2 e^{-\kappa a} = -C_3 \sin ka + C_4 \cos ka, \tag{3.276}$$

$$C_2 \kappa e^{-\kappa a} = k(C_3 \cos ka + C_4 \sin ka), \tag{3.277}$$

$$C_5 e^{-\kappa a} = C_3 \sin ka + C_4 \cos ka, \tag{3.278}$$

$$\kappa C_5 e^{-\kappa a} = k(C_3 \cos ka - C_4 \sin ka). \tag{3.279}$$

Сабирањем и одузимањем једначина (3.276) и (3.278), као и сабирањем и одузимањем једначина (3.277) и (3.279) добијамо следећи систем

$$\begin{aligned}(C_2 + C_5)e^{-\kappa a} &= 2C_4 \cos ka, &(3.280)\\ (C_2 - C_5)e^{-\kappa a} &= -2C_3 \cos ka, &(3.281)\\ (C_2 - C_5)\kappa e^{-\kappa a} &= 2kC_3 \cos ka, &(3.282)\\ (C_2 + C_5)\kappa e^{-\kappa a} &= 2kC_4 \cos ka. &(3.283)\end{aligned}$$

Ако поделимо једначину (3.283) једначином (3.280) под претпоставком $C_2 + C_5 \neq 0$, као и једначину (3.282) једначином (3.281) под претпоставком $C_2 - C_5 \neq 0$, добијамо, редом

$$\kappa = k tg\, ka, \qquad \kappa = -k ctg\, ka. \tag{3.284}$$

Није могуће да у исто време важе ове једнакости, па закључујемо да не могу у исто време да важе обе претпоставке $C_2 + C_5 \neq 0$ и $C_2 - C_5 \neq 0$.

- Ако је $C_2 + C_5 \neq 0$, као и $C_2 - C_5 = 0$, добијамо

$$\kappa = k tg\, ka, \qquad \psi(x) = \begin{cases} C_2 e^{\kappa a} & \text{за } x \in (-\infty, -a), \\ C_4 \cos ka & \text{за } x \in (-a, a), \\ C_2 e^{-\kappa a} & \text{за } x \in (a, \infty). \end{cases} \tag{3.285}$$

  Ако уведемо променљиве,

$$X = a\kappa \text{ и } Y = ak, \tag{3.286}$$

  једначину $\kappa = k tg\, ka$ можемо написати преко тих променљивих у облику

$$Y = X tg\, X. \tag{3.287}$$

  Како је

$$X^2 + Y^2 = a^2(\kappa^2 + k^2) = \frac{2ma^2V}{\hbar^2}, \tag{3.288}$$

  решење система постоји у пресеку кружнице и функције $Y = X tg\, X$. Решења се налазе графичком методом. Испоставља се да решење постоји за било коју вредност потенцијала.

- За $C_2 - C_5 \neq 0$, као и $C_2 + C_5 = 0$, добијамо

$$\kappa = -k ctg\, ka, \qquad \psi(x) = \begin{cases} C_2 e^{\kappa a} & \text{за } x \in (-\infty, -a), \\ C_3 \sin ka & \text{за } x \in (-a, a), \\ -C_2 e^{-\kappa a} & \text{за } x \in (a, \infty). \end{cases} \tag{3.289}$$

  Слично претходном случају, решења се налазе графичком методом, у пресеку кружнице $X^2 + Y^2 = \frac{2ma^2V}{\hbar^2}$ и функције $Y = -X ctg\, X$. Испоставља се да решења постоје само ако је

$$\frac{2ma^2V}{\hbar^2} \geq 1, \tag{3.290}$$

тако да је минимална вредност потенцијала за коју постоји решење у овом случају

$$V_{min} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \tag{3.291}$$

12. Хамилтонијан слободне честице је $\frac{p^2}{2m}$, тако да је оператор координате у Хајзенберговој слици једнак [6]

$$x_H = e^{i\frac{p^2}{2m}t} x e^{-i\frac{p^2}{2m}t} = x + [i\frac{p^2}{2m}t, x] + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!}(\frac{it}{2m})^n [p^2, ...[p^2, x]]. \tag{3.292}$$

Како је $[p^2, x] = p[p, x] + [p, x]p = -2i\hbar p$, добијамо $[p^2, [p^2, x]] = 2i\hbar[p^2, p] = 0$, тако да су сви чланови у суми једнаки нули и

$$x_H = x + \frac{\hbar t}{m} p. \tag{3.293}$$

Оператор импулса у Хајзенберговој слици је једнак

$$p_H = e^{i\frac{p^2}{2m}t} p e^{-i\frac{p^2}{2m}t} = p e^{i\frac{p^2}{2m}t} e^{-i\frac{p^2}{2m}t} = p. \tag{3.294}$$

Искористили смо да $p e^{i\frac{p^2}{2m}t} = e^{i\frac{p^2}{2m}t} p$ зато што ова два израза комутирају[7].

13. Веза таласних функција у координатној и импулсној репрезентацији је

$$\begin{aligned} \psi(\boldsymbol{r}) &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{pr}} \varphi(\boldsymbol{p}) d\boldsymbol{p}, \\ \varphi(\boldsymbol{p}) &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{pr}} \psi(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r}. \end{aligned} \tag{3.295}$$

док је веза потенцијала

$$\begin{aligned} V(\boldsymbol{r}) &= \int e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{pr}} W(\boldsymbol{p}) d\boldsymbol{p}, \\ W(\boldsymbol{p}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{pr}} V(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r}. \end{aligned} \tag{3.296}$$

Стационарна Шредингерова једначина у кординатној репрезентацији је

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\boldsymbol{r})\psi = E\psi, \tag{3.297}$$

док је њена форма у импулсној

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{pr}} \boldsymbol{p}^2 \varphi(\boldsymbol{p}) d\boldsymbol{p} + \int d\boldsymbol{p} \int e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}')\boldsymbol{r}} W(\boldsymbol{p}) \varphi(\boldsymbol{p}') d\boldsymbol{p}' - E \int e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{pr}} \varphi(\boldsymbol{p}) d\boldsymbol{p} = 0.$$

[6] Искористили смо *Baker Campbell Hausdorff* формулу.

[7] $e^{i\frac{p^2}{2m}t}$ је функција од p, а ми знамо да је $[f(p), p] = 0$.

Уколико у двоструком интегралу пређемо на интеграцију по $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{p}'' = \boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}'$ и потом $\boldsymbol{p}''$ означимо као $\boldsymbol{p}$ добијамо

$$\int d\boldsymbol{p} \int e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}} W(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\varphi(\boldsymbol{p}')d\boldsymbol{p}' \tag{3.298}$$

Сада ШЈ у импулсној репрезентацији има облик

$$\int d\boldsymbol{p} e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}} \Big[(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - E)\varphi(\boldsymbol{p}) + \int W(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\varphi(\boldsymbol{p}')d\boldsymbol{p}' \Big] = 0. \tag{3.299}$$

Да би овај услов био испуњен, мора важити

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\varphi(\boldsymbol{p}) + \int W(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\varphi(\boldsymbol{p}')d\boldsymbol{p}' = E\varphi(\boldsymbol{p}). \tag{3.300}$$

3.5 Линеарни хармонијски осцилатор

1. Хамилтонијан квантног линеарног хармонијског осцилатора је

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2. \tag{3.301}$$

Увођењем оператора креације и анихилације

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}), \qquad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}), \tag{3.302}$$

за које важи комутациона релација[8]

$$[a, a^\dagger] = 1, \tag{3.303}$$

хамилтонијан добија облик

$$\hat{H} = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}) = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}), \tag{3.304}$$

где је $\hat{N} = a^\dagger a$ оператор броја честица. Ако решимо својствени проблем оператора $\hat{N}$, уједно смо решили и својствени проблем хамилтонијана. Својствени проблем оператора $\hat{N}$ је

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle. \tag{3.305}$$

Ако делујемо оператором $\hat{N}$ на $a|n\rangle$ и искористимо комутациону релацију $[a, a^\dagger] = 1$, добићемо

$$\hat{N}a|n\rangle = a^\dagger a a|n\rangle = a(aa^\dagger - 1)|n\rangle = a\hat{N}|n\rangle - a|n\rangle = (n-1)a|n\rangle. \tag{3.306}$$

Видимо да је $a|n\rangle$ својствени вектор оператора $\hat{N}$ за својствену вредност $n-1$

$$a|n\rangle = C|n-1\rangle, \tag{3.307}$$

[8]Погледајте задатак 20 из одељка 1.3

где је C константа нормирања коју треба одредити.[9] Из чињенице да је[10]

$$\langle n|\hat{N}|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n \tag{3.308}$$

и

$$\langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = \langle n-1|C^* C|n-1\rangle = |C|^2\langle n-1|n-1\rangle = |C|^2, \tag{3.309}$$

налазимо

$$C = \sqrt{n}, \tag{3.310}$$

па је

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \tag{3.311}$$

Дејством оператора $\hat{N}$ на $a^\dagger|n\rangle$ уз коришћење комутационе релације $[a, a^\dagger] = 1$

$$\hat{N}a^\dagger|n\rangle = a^\dagger a a^\dagger|n\rangle = a^\dagger(a^\dagger a + 1)|n\rangle = a^\dagger\hat{N}|n\rangle + a^\dagger|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle, \tag{3.312}$$

добијамо да је $a^\dagger|n\rangle$ својствени вектор оператора $\hat{N}$ за својствену вредност $n+1$

$$a^\dagger|n\rangle = D|n+1\rangle. \tag{3.313}$$

D је непозната константа нормирања.[11] Како је

$$\langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|1 + a^\dagger a|n\rangle = \langle n|n\rangle + \langle n|\hat{N}|n\rangle = n+1 \tag{3.314}$$

и

$$\langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n+1|D^* D|n+1\rangle = |D|^2\langle n+1|n+1\rangle = |D|^2, \tag{3.315}$$

добијамо

$$D = \sqrt{n+1}, \tag{3.316}$$

тако да је деловање оператора креације на произвољни базисни вектор оператора $\hat{N}$ једнако

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \tag{3.317}$$

Увођењем генералисане координате $\hat{Q}$ и генералисаног импулса $\hat{P}$

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}, \quad \hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega\hbar}}, \tag{3.318}$$

операторе креације и анихилације можемо да напишемо у форми

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - iP). \tag{3.319}$$

---

[9] Приметимо да је $\Big(a|n\rangle\Big)^\dagger = \langle n|a^\dagger = \langle n-1|C^*$

[10] Својствени базис оператора $\hat{N}$ је ортонормиран, тако да важи $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$

[11] $\Big(a^\dagger|n\rangle\Big)^\dagger = \langle n|a = \langle n-1|D^*$

Оператори креације и анихилације у координатној репрезентацији[12] имају форму

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + \frac{d}{dQ}), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - \frac{d}{dQ}). \tag{3.320}$$

За $n = 0$ имамо вакуумско стање $|0\rangle$. Када оператор анихилације на њега добијамо вредност нула,

$$a|0\rangle = 0. \tag{3.321}$$

Уколико последњу једначину напишемо у репрезентацији генерализоване координате,[13]

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(Q + \frac{d}{dQ})\psi_0 = 0, \tag{3.322}$$

коју потом препишемо у облику

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -QdQ, \tag{3.323}$$

добијамо

$$\psi_0 = Ce^{-\frac{Q^2}{2}}. \tag{3.324}$$

Константу нормирања C ћемо одредити из услова

$$1 = \langle 0|0\rangle = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0|^2 dx = |C|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Q^2} dQ = |C|^2 \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}}, \tag{3.325}$$

тако да важи

$$\psi_0 = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} e^{-\frac{Q^2}{2}}. \tag{3.326}$$

Веза произвољног базисног вектора $|n\rangle$ и вакуумског стања $|0\rangle$ је

$$|n\rangle = \frac{a^\dagger}{\sqrt{n}}|n-1\rangle = \frac{(a^\dagger)^2}{\sqrt{n(n-1)}}|n-2\rangle = \cdots = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle. \tag{3.327}$$

Ако претходни израз напишемо у координатној репрезентацији

$$\psi_n = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} (Q - \frac{d}{dQ})^n e^{-\frac{Q^2}{2}}, \tag{3.328}$$

видимо да можемо наћи све својствене функције деловањем оператора $(Q - \frac{d}{dQ})^n$ на функцију $e^{-\frac{Q^2}{2}}$. Навешћемо пар својствених функција

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} 2Qe^{-\frac{Q^2}{2}}, \\
\psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{8}} \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} (4Q^2 - 2)e^{-\frac{Q^2}{2}}, \\
\psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{48}} \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} (8Q^3 - 12Q)e^{-\frac{Q^2}{2}}.
\end{aligned} \tag{3.329}$$

[12] Оператор $\hat{P}$ у координатној репрезентацији је $-i\frac{d}{dQ}$

[13] Својствено стање $|n\rangle$ у координатној репрезентацији је $\langle x|n\rangle = \psi_n$

Функције $2Q$, $(4Q^2-2)$, $(8Q^3-12Q)$ су Хермитови[14] полиноми, првог другог и трећег степена, редом. Општа формула за Хермитов полином је

$$H_n(Q)=e^{\frac{Q^2}{2}}(Q-\frac{d}{dQ})^n e^{-\frac{Q^2}{2}}, \tag{3.330}$$

па се својствене функције могу написати у облику

$$\psi_n(Q)=\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}e^{-\frac{Q^2}{2}}H_n(Q). \tag{3.331}$$

Својствене енергије Хамилтонијана су дискретне

$$E_n=\langle n|H|n\rangle=\langle n|\hbar\omega(\hat{N}+\frac{1}{2})|n\rangle=\hbar\omega(n+\frac{1}{2}),\quad n=0,1,2,... \tag{3.332}$$

Енергија основног стања је

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega. \tag{3.333}$$

2.

$$\langle\hat{x}\rangle_{|n\rangle}=\langle n|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^\dagger)|n\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\Big[\langle n|a|n\rangle+\langle n|a^\dagger|n\rangle\Big]. \tag{3.334}$$

Како је

$$\begin{aligned}\langle n|a|n\rangle &= \sqrt{n}\langle n|n-1\rangle=0,\\ \langle n|a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}\langle n|n+1\rangle=0,\end{aligned} \tag{3.335}$$

закључујемо да је

$$\langle\hat{x}\rangle_{|n\rangle}=0. \tag{3.336}$$

Даље,

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}^2\rangle_{|n\rangle} &= \langle n|\frac{\hbar}{2m\omega}(a+a^\dagger)^2|n\rangle\\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\Big[\langle n|aa|n\rangle+\langle n|a^\dagger a|n\rangle+\langle n|aa^\dagger|n\rangle+\langle n|a^\dagger a^\dagger|n\rangle\Big].\end{aligned} \tag{3.337}$$

Када израчунамо матричне елементе

$$\begin{aligned}\langle n|aa|n\rangle &= \sqrt{n(n-1)}\langle n|n-2\rangle=0,\\ \langle n|a^\dagger a|n\rangle &= \sqrt{n}\langle n|a^\dagger|n-1\rangle=\sqrt{n}\sqrt{n}\langle n|n\rangle=n,\\ \langle n|aa^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}\langle n|a|n+1\rangle=\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\langle n|n\rangle=n+1,\\ \langle n|a^\dagger a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}\langle n|a^\dagger|n+1\rangle=\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\langle n|n+2\rangle=0,\end{aligned} \tag{3.338}$$

добијамо

$$\langle\hat{x}^2\rangle_{|n\rangle}=\frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1). \tag{3.339}$$

[14]Ознака за Хермитов полином је H_n, H_1 је Хермитов полином првог степена, H_2 Хермитов полином другог...

Генерално, матрични елемент који садржи k оператора креације и l оператора анихилације

$$\langle n|aaa^\dagger a^\dagger aa...a^\dagger aa|m\rangle \tag{3.340}$$

је ненулти ако је $k-l=n-m$ и ако приликом деловања оператора креације и анихилације на произвољна стањ1а никада не дођмо до случаја $a|0\rangle=0$, јер тада матрични елемент аутоматски постаје једнак нули. Илустоваћемо то на пар примера.

ПРИМЕР 1

Матрични елемент

$$\langle 2|a^\dagger a^\dagger a^\dagger a|0\rangle = 0 \tag{3.341}$$

је једнак нули иако је задовољен услов $k-l=n-m$[15] јер опера тор анихилације делује на вакуумско стање $|0\rangle$.

ПРИМЕР 2

Матрични елемент

$$\begin{aligned}\langle 3|a^\dagger a^\dagger a^\dagger a|1\rangle &= \sqrt{1}\langle 3|a^\dagger a^\dagger a^\dagger|0\rangle = \sqrt{2}\langle 3|a^\dagger a^\dagger|1\rangle = \sqrt{2}\sqrt{3}\langle 3|a^\dagger|2\rangle \\ &= \sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{4}\langle 3|3\rangle = \sqrt{24}\end{aligned} \tag{3.342}$$

је различит од нуле јер је задовољен услов $k-l=n-m$ и оператор анихилације не делује на вакуумско стање $|0\rangle$.

Сада се можемо вратити нашем задатку. Средња вредност оператора импулса је једнака нули

$$\langle \hat{p}\rangle_{|n\rangle} = \langle n|-i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a-a^\dagger)|n\rangle = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\Big[\langle n|a|n\rangle - \langle n|a^\dagger|n\rangle\Big], \tag{3.343}$$

јер су матрични елементи $\langle n|a|n\rangle=0$ и $\langle n|a^\dagger|n\rangle=0$. Средња вредност квадрата оператора импулса је

$$\begin{aligned}\langle \hat{p}^2\rangle_{|n\rangle} &= \langle n|-\frac{m\omega\hbar}{2}(a-a^\dagger)^2|n\rangle \\ &= -\frac{m\omega\hbar}{2}\Big[\langle n|aa|n\rangle - \langle n|a^\dagger a|n\rangle - \langle n|aa^\dagger|n\rangle + \langle n|a^\dagger a^\dagger|n\rangle\Big].\end{aligned} \tag{3.344}$$

Ненулти матричи елементи су

$$\begin{aligned}\langle n|a^\dagger a|n\rangle &= n, \\ \langle n|aa^\dagger|n\rangle &= n+1,\end{aligned} \tag{3.345}$$

тако да је

$$\langle \hat{p}^2\rangle_{|n\rangle} = \frac{m\omega\hbar}{2}(2n+1). \tag{3.346}$$

[15] $k=3,\ l=1,\ n=2,\ m=0$

Неодређеност координате и импулса су, редом

$$\begin{aligned}
\Delta\hat{x} &= \sqrt{\langle\hat{x}^2\rangle_{|n\rangle} - \langle\hat{x}\rangle^2_{|n\rangle}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)}, \\
\Delta\hat{p} &= \sqrt{\langle\hat{p}^2\rangle_{|n\rangle} - \langle\hat{p}\rangle^2_{|n\rangle}} = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}(2n+1)},
\end{aligned} \tag{3.347}$$

Сама можемо да израчунамо неодређеност ЛХО

$$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} = \frac{\hbar}{2}(2n+1) \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{3.348}$$

Минимална неодређеност је у основном стању, за $n = 0$.

3. Матрични елементи Хамилтонијана $\hat{H}$ у својственом базису су[16]

$$[\hat{H}]_{ij} = \langle i|\hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})|j\rangle = \hbar\omega \underbrace{\langle i|a^\dagger a|j\rangle}_{j\delta_{ij}} + \hbar\omega\frac{1}{2}\langle i|j\rangle = \hbar\omega\delta_{ij}(j+\frac{1}{2}), \tag{3.349}$$

тако да је репрезентација Хамилтонијана у овом базису,

$$[\hat{H}] = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar\omega & & & \dots \\ & \frac{3}{2}\hbar\omega & & \dots \\ & & \frac{5}{2}\hbar\omega & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \tag{3.350}$$

дијагонална, што је и очекиван0 јер је овај базис својствени за Хамилтонијан.

Произвољан матрични елемент оператора координате је

$$\begin{aligned}
[\hat{x}]_{ij} &= \langle i|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^\dagger)|j\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\Big(\underbrace{\langle i|a|j\rangle}_{\sqrt{j}\delta_{i,j-1}} + \underbrace{\langle i|a^\dagger|j\rangle}_{\sqrt{j+1}\delta_{i,j+1}} \Big) \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{j}\delta_{i,j-1} + \sqrt{j+1}\delta_{i,j+1}).
\end{aligned} \tag{3.351}$$

Матрицна репрезентација оператора координате је

$$[\hat{x}] = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{3.352}$$

Она је недијагонална и има ненулте матричне елементе на дијагоналама изнад и испод главне дијагонале.

[16] i и j узимају вредности $0, 1, 2, 3...$

Слично налазимо и матричи елемент оператора импулса,

$$
\begin{aligned}
[\hat{p}]_{ij} &= \langle i| - i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a-a^\dagger)|j\rangle = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\Big(\underbrace{\langle i|a|j\rangle}_{\sqrt{j}\delta_{i,j-1}} - \underbrace{\langle i|a^\dagger|j\rangle}_{\sqrt{j+1}\delta_{i,j+1}}\Big) \\
&= -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\sqrt{j}\delta_{i,j-1} - \sqrt{j+1}\delta_{i,j+1}),
\end{aligned}
\tag{3.353}
$$

као и репрезентацију истог

$$
[\hat{p}] = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots \\ -1 & 0 & \sqrt{2} & \dots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{3.354}
$$

Видимо да је и репрезентација оператора импулса недијагонална и, као и $\hat{x}$, има ненулте матричне елементе на дијагоналама изнад и испод главне дијагонале.

Како увек важи $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$, може се проверити да ова комутациона релација важи и у овом базису. Наравно, то је очекивано, али није на одмет извршити проверу.[17]

4. Прво треба одредити конастанту нормирања C. Из услова нормираности таласне функције на јединицу,

$$
\begin{aligned}
1 &= \langle\psi|\psi\rangle = \Big(\frac{\sqrt{2}}{2}\langle 0| + \frac{\sqrt{2}}{4}\langle 2| + c\langle 3|\Big)\Big(\frac{\sqrt{2}}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{2}}{4}|2\rangle + c|3\rangle\Big) \\
&= \frac{2}{4}\langle 0|0\rangle + \frac{2}{16}\langle 2|2\rangle + c^2\langle 3|3\rangle = \frac{10}{16} + c^2,
\end{aligned}
\tag{3.355}
$$

налазимо

$$
C = \frac{\sqrt{6}}{4}. \tag{3.356}
$$

Средња вредност координате у стању $|\psi\rangle$ је[18]

$$
\begin{aligned}
\langle\hat{x}\rangle &= \Big(\frac{\sqrt{2}}{2}\langle 0| + \frac{\sqrt{2}}{4}\langle 2| + \frac{\sqrt{6}}{4}\langle 3|\Big)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^\dagger)\Big(\frac{\sqrt{2}}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{2}}{4}|2\rangle + \frac{\sqrt{6}}{4}|3\rangle\Big) \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\frac{\sqrt{3}}{8}\underbrace{\langle 2|a|3\rangle}_{=\sqrt{3}} + \frac{\sqrt{3}}{8}\underbrace{\langle 3|a^\dagger|2\rangle}_{\sqrt{3}}) \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{3}{4}.
\end{aligned}
\tag{3.357}
$$

[17]Комутациона релација између координате и импулса је једнака $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar I$, где је I бесконачно димензионална јединична матрица. Обично се I не пише али подразумева.

[18]У једначини ћемо писати само ненулте матричне елементе, остале ћемо изоставити ради компактности израза

Средња вредност оператора импулса у стању $|\psi\rangle$

$$\begin{aligned}
\langle\hat{p}\rangle &= -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\Big(\frac{\sqrt{2}}{2}\langle 0| + \frac{\sqrt{2}}{4}\langle 2| + \frac{\sqrt{6}}{4}\langle 3|\Big)(a-a^\dagger)\Big(\frac{\sqrt{2}}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{2}}{4}|2\rangle + \frac{\sqrt{6}}{4}|3\rangle\Big) \\
&= -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\frac{\sqrt{3}}{8}\underbrace{\langle 2|a|3\rangle}_{=\sqrt{3}} - \frac{\sqrt{3}}{8}\underbrace{\langle 3|a^\dagger|2\rangle}_{\sqrt{3}}) \\
&= 0. \qquad (3.358)
\end{aligned}$$

Слично, средња вредност квадрата оператора импулса је

$$\langle\hat{x}^2\rangle = \Big(\frac{\sqrt{2}}{2}\langle 0| + \frac{\sqrt{2}}{4}\langle 2| + \frac{\sqrt{6}}{4}\langle 3|\Big)\frac{\hbar}{2m\omega}(a+a^\dagger)^2\Big(\frac{\sqrt{2}}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{2}}{4}|2\rangle + \frac{\sqrt{6}}{4}|3\rangle\Big). \quad (3.359)$$

Израчунавањем ненултих матричних елемената

$$\begin{aligned}
\langle 0|aa|2\rangle &= \sqrt{2}, \\
\langle 2|aa|0\rangle &= \sqrt{2}, \\
\langle 0|aa^\dagger|0\rangle &= 1, \\
\langle 2|a^\dagger a + aa^\dagger|2\rangle &= 5, \\
\langle 3|a^\dagger a + aa^\dagger|3\rangle &= 7, \qquad (3.360)
\end{aligned}$$

добијамо

$$\langle\hat{x}^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(\frac{\sqrt{2}}{2} + \frac{49}{8}). \quad (3.361)$$

Средња вредност квадрата оператора импулса је

$$\langle\hat{p}^2\rangle = \Big(\frac{\sqrt{2}}{2}\langle 0| + \frac{\sqrt{2}}{4}\langle 2| + \frac{\sqrt{6}}{4}\langle 3|\Big) - \frac{m\omega\hbar}{2}(a-a^\dagger)^2\Big(\frac{\sqrt{2}}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{2}}{4}|2\rangle + \frac{\sqrt{6}}{4}|3\rangle\Big). \quad (3.362)$$

Ненулти матрични елеменати су, као и код средње вредности квадрата оператора координате,

$$\begin{aligned}
\langle 0|aa|2\rangle &= \sqrt{2}, \\
\langle 2|a^\dagger a^\dagger|0\rangle &= \sqrt{2}, \\
\langle 0|aa^\dagger|0\rangle &= 1, \\
\langle 2|a^\dagger a + aa^\dagger|2\rangle &= 5, \\
\langle 3|a^\dagger a + aa^\dagger|3\rangle &= 7, \qquad (3.363)
\end{aligned}$$

тако да је

$$\langle\hat{p}^2\rangle = m\omega\hbar(\frac{11}{16} - \frac{\sqrt{2}}{4}). \quad (3.364)$$

Неодређеност координате је

$$\Delta\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}(\frac{\sqrt{2}}{2} + \frac{43}{8})}, \quad (3.365)$$

док је неодређеност импулса

$$\Delta\hat{p} = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}(\frac{11}{8} - \frac{\sqrt{2}}{2})}, \tag{3.366}$$

Тако да је неодређеност ЛХО у стању $|\psi\rangle$ једнака

$$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} = \hbar\sqrt{(\frac{11}{8} - \frac{\sqrt{2}}{2})(\frac{\sqrt{2}}{2} + \frac{43}{8})}. \tag{3.367}$$

Приметимо да је лакше урадити задатак ако израчунамо $\langle\hat{x}\rangle$, $\langle\hat{p}\rangle$, $\langle\hat{x}^2\rangle$ и $\langle\hat{H}\rangle$, док $\langle\hat{p}^2\rangle$ можемо да нађемо користећи релацију

$$\langle\hat{H}\rangle = \frac{1}{2m}\langle\hat{p}^2\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2\langle\hat{x}^2\rangle \Rightarrow \langle\hat{p}^2\rangle = 2m(\langle\hat{H}\rangle - \frac{1}{2}m\omega^2\langle\hat{x}^2\rangle). \tag{3.368}$$

Средњу вредност хамилтонијана је

$$\langle\hat{H}\rangle = \Big(\frac{\sqrt{2}}{2}\langle 0| + \frac{\sqrt{2}}{4}\langle 2| + \frac{\sqrt{6}}{4}\langle 3|\Big)\hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})\Big(\frac{\sqrt{2}}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{2}}{4}|2\rangle + \frac{\sqrt{6}}{4}|3\rangle\Big). \tag{3.369}$$

Ненулти матрични елементи су

$$\begin{aligned} \langle 0|a^\dagger a + \frac{1}{2}|0\rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle 2|a^\dagger a + \frac{1}{2}|2\rangle &= \frac{5}{2}, \\ \langle 3|a^\dagger a + \frac{1}{2}|3\rangle &= \frac{7}{2}, \end{aligned} \tag{3.370}$$

тако да је

$$\langle\hat{H}\rangle = \frac{15}{8}\hbar\omega. \tag{3.371}$$

5. Предвиђен за самосталан рад.

6. Прво ћемо наћи операторе креације и анихилације у Хајзенберговој слици

$$\begin{aligned} a_H &= e^{\frac{iHt}{\hbar}} a e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = e^{i\omega t(a^\dagger a + \frac{1}{2})} a e^{-i\omega t(a^\dagger a + \frac{1}{2})} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(i\omega t)^n [a^\dagger a + \frac{1}{2}, [..., [a^\dagger a + \frac{1}{2}, a]. \end{aligned} \tag{3.372}$$

Како је $[a^\dagger a + \frac{1}{2}, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger[a, a] + [a^\dagger, a]a = -a$, закључујемо да су n комутатора једнака $[a^\dagger a + \frac{1}{2}, [..., [a^\dagger a + \frac{1}{2}, a] = (-1)^n a$, тако да добијамо

$$a_H = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(i\omega t)^n (-1)^n a = e^{-i\omega t} a. \tag{3.373}$$

Одмах налазимо $a_H^\dagger = (e^{-i\omega t}a)^\dagger = e^{i\omega t}a^\dagger$ и

$$\begin{aligned} x_H &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_H + a_H^\dagger) = x\cos\omega t + \frac{p}{m\omega}\sin\omega t, \\ p_H &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a_H^\dagger - a_H) = p\cos\omega t - m\omega x\sin\omega t, \end{aligned} \tag{3.374}$$

тако да је $[x_H(t_1), p_H(t_2)] = i\cos\omega(t_1 - t_2)$ и $[x_H(t_1), x_H(t_2)] = \frac{i}{m\omega}\sin\omega(t_1 - t_2)$.

7. Решаваћемо једначину 3.300. Потенцијал је једнак $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Сада можемо да нађемо $U(p-p')$

$$\begin{aligned} U(p-p') &= \frac{m\omega^2}{4\pi\hbar}\int x^2 e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x}dx = -\frac{m\omega^2\hbar}{4\pi}\frac{\partial}{\partial p^2}\int e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x}dx \\ &= -\frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\delta(p-p'). \end{aligned} \tag{3.375}$$

Једначина 3.300 сада има облик

$$[\frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial p^2}]\varphi(p) = E\varphi(p). \tag{3.376}$$

Последњи израз је идентичан Шредингеровој једначини у координатној репрезентацији, тако да су својствене функцоје и својствене енергије

$$\begin{aligned} \varphi_n(p) &= \frac{e^{-p^2/2m\omega\hbar}}{\sqrt{2^n n!\sqrt{m\omega\pi\hbar}}}H_n(\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}), \\ E_n &= \hbar\omega(n+\frac{1}{2}),\ \ n\ =\ 0,1,2,... \end{aligned} \tag{3.377}$$

3.6 Угаони момент

1. Векторски оператор угаоног момента импулса,

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}} = \hat{L}_x\boldsymbol{e}_x + \hat{L}_y\boldsymbol{e}_y + \hat{L}_z\boldsymbol{e}_z, \tag{3.378}$$

је дефинисан у простору стања

$$V(\mathbf{R}) = V(\mathbf{R}_x)\otimes V(\mathbf{R}_y)\otimes V(\mathbf{R}_z). \tag{3.379}$$

Декартове компоненте векторског оператора угаоног момента су

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, \end{aligned} \tag{3.380}$$

и живе, редом, у просторима стања $V(\mathbf{R}_x)$, $V(\mathbf{R}_y)$ и $V(\mathbf{R}_z)$. Компоненте угаоног момента задовољају комутационе релације

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k, \tag{3.381}$$

где је ϵ_{ijk} тензор Леви-Чивита[19] Показаћемо да је $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$ користећи комутационе релације $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ и особину да је $[AB, CD] = A[B, C]D + AC[B, D] + C[A, D]B + [A, C]DB$, а остале комутационе релације између других компонената угаоног момента се аналогно доказују.

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] \\
&= \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{y}\hat{z}[\hat{p}_z, \hat{p}_x] + \hat{z}[\hat{y}, \hat{p}_x]\hat{p}_z + [\hat{y}, \hat{z}]\hat{p}_x\hat{p}_z \\
&+ \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{x}]\hat{p}_z + \hat{z}\hat{x}[\hat{p}_y, \hat{p}_z] + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y + [\hat{z}, \hat{x}]\hat{p}_z\hat{p}_y \\
&- \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{z}]\hat{p}_x - \hat{z}\hat{z}[\hat{p}_y, \hat{p}_x] - \hat{z}[\hat{z}, \hat{p}_x]\hat{p}_y - [\hat{z}, \hat{z}]\hat{p}_x\hat{p}_y \\
&- \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{x}]\hat{p}_z - \hat{y}\hat{x}[\hat{p}_z, \hat{p}_z] - \hat{x}[\hat{y}, \hat{p}_z]\hat{p}_z - [\hat{y}, \hat{x}]\hat{p}_z\hat{p}_z \\
&= \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y \\
&= -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{p}_y \\
&= i\hbar\hat{L}_z.
\end{aligned} \tag{3.382}$$

У шестом реду претходне једначине смо написали само оне комутаторе који су ненулти. Ако уведемо скаларни оператор

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \tag{3.383}$$

и искористимо малопре наведене комутационе релације

$$\begin{aligned}
[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_z] &= [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x^2, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_z] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_z] \\
&= \hat{L}_x[\hat{L}_x, \hat{L}_z] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z]\hat{L}_x + \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y, \hat{L}_z]\hat{L}_y \\
&= -i\hbar\hat{L}_x\hat{L}_y - i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_x + i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_x + i\hbar\hat{L}_x\hat{L}_y \\
&= 0,
\end{aligned} \tag{3.384}$$

закључујемо да оператори $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ и $\hat{L}_z$ комутирају, тј. имају заједнички својствени базис. У координатној репрезентацији компоненте момента импулса су једнаке

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}), \\
\hat{L}_y &= -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}), \\
\hat{L}_z &= -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}).
\end{aligned} \tag{3.385}$$

Ако желимо да ове операторе напишемо у сферним координатама, прелазимо у простор стања

$$V(\mathbf{R}) = V(r) \otimes V(\theta) \otimes V(\varphi), \tag{3.386}$$

[19] Тотално антисиметричан тензор по свим индексима $\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{jik} = -\epsilon_{kji} = -\epsilon_{ikj}$, који је једнак нули ако су два индекса једнака. По дефиницији је $\epsilon_{123} = 1$

где $r \in [0, \infty)$, $\theta \in [0, \pi]$ и $\varphi \in [0, 2\pi]$. Да бисмо написали компоненте векторског оператора у овом простору стања морамо да изразимо парцијалне изводе $\frac{\partial}{\partial x}$, $\frac{\partial}{\partial y}$, $\frac{\partial}{\partial z}$ помоћу парцијалних извода $\frac{\partial}{\partial r}$, $\frac{\partial}{\partial \theta}$ и $\frac{\partial}{\partial \varphi}$. Уз помоћ пар елементарних трансформација долазимо до следећих израза

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}, \\
\frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r}\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}, \\
\frac{\partial}{\partial z} &= \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}. \qquad (3.387)
\end{aligned}$$

Ако искористимо ове релације, компоненете угаоног момента постају

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= i\hbar(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} + ctg\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi}), \\
\hat{L}_y &= -i\hbar(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} - ctg\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi}), \\
\hat{L}_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial \varphi}. \qquad (3.388)
\end{aligned}$$

Видимо да све компоненте зависе само ог углова, па и квадрат угаоног момента живи у простору $V(\theta)$ Сада желимо да изразимо квадрат угаоног момента у сферним координатама. Њега добијамо када делујемо са $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ на произвољну функцију $f(\theta, \varphi)$,

$$\begin{aligned}
&\hat{L}^2 f(\theta,\varphi) = (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2) f(\theta,\varphi) = \\
&= -\hbar^2\Big[(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} + ctg\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi})(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} + ctg\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi}) \\
&+ (\cos\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} - ctg\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi})(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} - ctg\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi}) + \frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial}{\partial \varphi}\Big] f(\theta,\varphi) \\
&= -\hbar^2\Big[\Big(\sin^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\sin\varphi\cos\varphi}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi} + \sin\varphi\cos\varphi ctg\theta\frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial}{\partial \theta} + ctg\theta\cos^2\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} \\
&+ \sin\varphi\cos\varphi ctg\theta\frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial}{\partial \theta} - \sin\varphi\cos\varphi ctg^2\theta\frac{\partial}{\partial \varphi} + \cos^2\varphi ctg^2\theta\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\Big) \\
&+ \Big(\cos^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{\sin\varphi\cos\varphi}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi} - \sin\varphi\cos\varphi ctg\theta\frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial}{\partial \theta} + ctg\theta\sin^2\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} \\
&- \sin\varphi\cos\varphi ctg\theta\frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial}{\partial \theta} + \sin\varphi\cos\varphi ctg^2\theta\frac{\partial}{\partial \varphi} + ctg^2\theta\sin^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\Big) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\Big] f(\theta,\varphi) \\
&= -\hbar^2\Big[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + ctg\theta\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\Big] f(\theta,\varphi) \\
&= -\hbar^2\Big[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\Big] f(\theta,\varphi), \qquad (3.389)
\end{aligned}$$

тако да је

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\Big[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\Big]. \qquad (3.390)$$

Сада када знамо оба оператора у сферним координатама можемо да решавамо заједнички својствени проблем оба оператора. Нека је $Y(\theta,\varphi)$ = заједничка својствена функција. Својствени проблем оператора $\hat{L}_z$ је

$$\hat{L}_z Y(\theta,\varphi) \;\; = \;\; bY(\theta,\varphi). \tag{3.391}$$

Ако напишемо својствену функцију у облику $Y(\theta,\varphi) = P(\theta)F(\varphi)$, једначина се даље трансформише у

$$\begin{aligned}
& -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}P(\theta)F(\varphi) = bP(\theta)F(\varphi) \\
& \Rightarrow \;\; -i\hbar\frac{\partial F(\varphi)}{\partial\varphi}P(\theta) = bP(\theta)F(\varphi) \\
& \Rightarrow \;\; \frac{\partial F(\varphi)}{F(\varphi)} = \frac{i}{\hbar}b\,d\varphi \\
& \Rightarrow \;\; F(\varphi) = Ce^{\frac{i}{\hbar}b\varphi}.
\end{aligned} \tag{3.392}$$

Из услова

$$\begin{aligned}
& F(\varphi) = F(\varphi+2\pi) \\
\Leftrightarrow \;\; & Ce^{\frac{i}{\hbar}\,b\,\varphi} = Ce^{\frac{i}{\hbar}b(\varphi+2\pi)} \\
\Rightarrow \;\; & e^{\frac{i}{\hbar}\,b\,2\pi} = 1.
\end{aligned} \tag{3.393}$$

добијамо

$$b = m\hbar, \;\; m = 0, \pm 1, \pm 2... \tag{3.394}$$

Константу нормирања, C, одређујемо из услова

$$\begin{aligned}
1 \;\; & = \;\; \int_0^{2\pi}|F(\varphi)|^2 d\varphi = |C|^2\int_0^{2\pi}e^{im\varphi}e^{-im\varphi}d\varphi = |C|^2 2\pi \\
& \Rightarrow \;\; C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}},
\end{aligned} \tag{3.395}$$

тако да је

$$F(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}. \tag{3.396}$$

Једначине (3.390) и (3.396) нам трансформишу својствену једначину оператора $\hat{L}^2$ у

$$-\hbar^2\Big[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Big]P(\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} = aP(\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}. \tag{3.397}$$

Ако делујемо оператором $\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ на $e^{im\varphi}$ добијамо једначину по θ

$$-\hbar^2\Big[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) - \frac{m^2}{\sin\theta}\Big]P(\theta) = aP(\theta). \tag{3.398}$$

Решења постоје уколико је

$$a^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1), \quad l = 0, 1, 2, 3, ... \quad m = -\ell, ..., \ell. \tag{3.399}$$

Својствене функције $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ се називају сферни хармоници. Оне се у кет нотацији означавају као $|\ell, m\rangle$. Сферни хармоници у бра кет нотацији задовољавају једнакост

$$\langle \ell, m | \ell', m' \rangle = \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'} \tag{3.400}$$

Иста та једнакост се у (θ, φ) репрезентацији може записати као

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_\ell^{*m}(\theta, \varphi) Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'}. \tag{3.401}$$

2. *а)*

$$\begin{aligned} \hat{L}_\pm \hat{L}_\mp &= (\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y)(\hat{L}_x \mp i\hat{L}_y) = \hat{L}_x^2 \pm i\hat{L}_y\hat{L}_x \mp i\hat{L}_x\hat{L}_y + \hat{L}_y^2 = \underbrace{\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2}_{\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2} \mp i \underbrace{[\hat{L}_x, \hat{L}_y]}_{i\hbar\hat{L}_z} \\ &= \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \pm i\, i\hbar\hat{L}_z \\ &= \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \pm \hbar\hat{L}_z. \end{aligned} \tag{3.402}$$

Помоћу ових израза можемо закључити да су сви комутатори

$$[\hat{L}_-\hat{L}_+, \hat{L}_+\hat{L}_-] = 0, \quad [\hat{L}_+\hat{L}_-, \hat{L}_z] = 0, \quad [\hat{L}_+\hat{L}_-, \hat{L}_z] = 0, \tag{3.403}$$

једнаки нули јер се своде на збир или разлику комутатора

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0, \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_z^2] = 0, \quad [\hat{L}_z^2, \hat{L}_z] = 0, \tag{3.404}$$

који су једнаки нули.

б).

Прво ћемо израчунати комутатор

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] &= [\hat{L}_z, \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y] = [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \pm i[\hat{L}_z, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_y \pm \hbar\hat{L}_x = \pm\hbar(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y) \\ &= \pm\hbar\hat{L}_\pm. \end{aligned} \tag{3.405}$$

Ако делујемо оператором $\hat{L}_z$ делује на вектор $\hat{L}_\pm|\ell, m\rangle$ и искористимо претходно изведену комутациону релацију

$$\begin{aligned} \hat{L}_z\hat{L}_\pm|\ell, m\rangle &= (\pm\hbar\hat{L}_\pm + \hat{L}_\pm\hat{L}_z)|\ell, m\rangle = (\pm\hbar\hat{L}_\pm + \hat{L}_\pm\hbar m)|\ell, m\rangle \\ &= (m \pm 1)\hbar\hat{L}_\pm|\ell, m\rangle, \end{aligned} \tag{3.406}$$

видимо да је $\hat{L}_\pm|\ell, m\rangle$ својствени вектор оператора $\hat{L}_z$ за својствену вредност $m \pm 1$,

$$|\ell, m \pm 1\rangle = C_\pm \hat{L}_\pm |\ell, m\rangle, \tag{3.407}$$

где је $C_\pm$ константа нормирања коју треба одредити. Из услова нормираности таласне функције,

$$\begin{aligned}
1 &= \langle \ell, m \pm 1 | \ell, m \pm 1\rangle = \langle \ell, m | \hat{L}_\mp \hat{L}_\pm | \ell, m\rangle \\
&= |C_\pm|^2 \langle \ell, m | \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \mp \hbar \hat{L}_z | \ell, m\rangle = |C_\pm|^2 \langle \ell, m | \hbar^2 \ell(\ell+1) - m^2\hbar^2 \mp \hbar^2 m | \ell, m\rangle \\
&= \hbar^2 \big(\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)\big), \qquad (3.408)
\end{aligned}$$

налазимо коефицијент нормирања

$$C_\pm = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm1)}. \qquad (3.409)$$

3. Оператори подизања и спуштања $\hat{L}_\pm$ у (θ, φ) репрезентацији су

$$\hat{L}_\pm = \hbar e^{\pm i\varphi}(i ctg\theta \partial_\varphi \pm \partial_\theta). \qquad (3.410)$$

Знамо да је

$$\hat{L}_+|1,0\rangle = \hbar\sqrt{1(1+1) - 0(0+1)}|1,1\rangle = \hbar|1,1\rangle. \qquad (3.411)$$

Ако ову једначину запишемо у (θ, φ) репрезентацији, добијамо

$$\hat{L}_+\langle\theta,\varphi|1,0\rangle = \hbar\sqrt{1}\langle\theta,\varphi|1,1\rangle,$$

$$\hbar e^{i\varphi}(i ctg\theta\partial_\varphi + \partial_\theta) Y_1^0(\theta,\varphi) = \hbar\sqrt{2}Y_1^1(\theta,\varphi),$$

$$Y_1^1(\theta,\varphi) = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}\hbar e^{i\varphi}(i ctg\theta\partial_\varphi + \partial_\theta)\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{i\varphi}. \qquad (3.412)$$

Да бисмо нашли $|1,-1\rangle$, деловаћемо оператором $\hat{L}_-$ на $|1,0\rangle$

$$\hat{L}_-|1,0\rangle = \hbar\sqrt{1(1+1) - 0(0-1)}|1,-1\rangle = \hbar\sqrt{2}|1,-1\rangle. \qquad (3.413)$$

Ова једначина у (θ, φ) репрезентацији има облик

$$\hbar e^{-i\varphi}(i ctg\theta\partial_\varphi - \partial_\theta)\cdot\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta\right] = \hbar\sqrt{2}Y_1^{-1}(\theta,\varphi), \qquad (3.414)$$

одакле добијамо

$$Y_1^{-1}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi}. \qquad (3.415)$$

4. *a)*

Како је

$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2}, \qquad (3.416)$$

средња вредност $\langle\hat{L}_x\rangle$ је једнака

$$\begin{aligned}
\langle\hat{L}_x\rangle &= \frac{1}{2}\langle\ell,m|\hat{L}_+ + \hat{L}_-|\ell,m\rangle \\
&= \frac{\hbar}{2}\Big[C_+\langle\ell,m|\ell,m+1\rangle + C_-\langle\ell,m|\ell,m-1\rangle\Big] \\
&= 0. \qquad (3.417)
\end{aligned}$$

б)

$$\hat{L}_x^2 = \frac{(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)^2}{4} = \frac{1}{4}(\hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2 + \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+). \tag{3.418}$$

Средња вредност оператора $\hat{L}_x^2$ је

$$\begin{aligned} \langle \ell, m|\hat{L}_x^2|\ell, m\rangle &= \frac{1}{4}\langle \ell, m|\hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2 + \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+|\ell, m\rangle \\ &= \frac{1}{4}\langle \ell, m|\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+|\ell, m\rangle. \end{aligned} \tag{3.419}$$

Како је

$$\hat{L}_\pm\hat{L}_\mp = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \pm \hbar\hat{L}_z, \tag{3.420}$$

добијамо

$$\langle \hat{L}_x^2\rangle = \frac{1}{2}\langle \ell, m|\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2|\ell, m\rangle = \frac{1}{2}\hbar^2\Big[\ell(\ell+1) - m^2\Big]. \tag{3.421}$$

v)

$$\hat{L}_y = \frac{\hat{L}_+ - \hat{L}_-}{2i}, \tag{3.422}$$

на основу чега добијамо

$$\begin{aligned} \langle \hat{L}_x\hat{L}_y\rangle &= \frac{1}{4i}\langle \ell, m|\hat{L}_+^2 - \hat{L}_-^2 - \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+|\ell, m\rangle \\ &= \frac{1}{4i}\langle \ell, m|\hat{L}_-\hat{L}_- - \hat{L}_+\hat{L}_-|\ell, m\rangle = \frac{1}{4i}\langle \ell, m| - 2\hbar\hat{L}_z|\ell, m\rangle \\ &= -\frac{2m\hbar^2}{4i} = \frac{im\hbar^2}{2}. \end{aligned} \tag{3.423}$$

г) Оператор пројекције момента импулса на произвољну осу $\boldsymbol{n}$ је

$$\hat{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{n} = \hat{L}_x \sin\theta\cos\varphi + \hat{L}_y \sin\theta\sin\varphi + \hat{L}_z\cos\theta. \tag{3.424}$$

Средња вредност тог оператора у стању $|\ell, m\rangle$ је

$$\begin{aligned} \langle \hat{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{n}\rangle &= \sin\theta\cos\varphi\langle \ell, m|\hat{L}_x|\ell, m\rangle + \sin\theta\sin\varphi\langle \ell, m|\hat{L}_y|\ell, m\rangle + \cos\theta\langle \ell, m|\hat{L}_z|\ell, m\rangle \\ &= \cos\theta\langle \ell, m|\hat{L}_z|\ell, m\rangle = \cos\theta m\hbar\langle \ell, m|\ell, m\rangle \\ &= m\hbar\cos\theta. \end{aligned} \tag{3.425}$$

д) Предвиђен за самосталан рад.

5. Простор стања у коме радимо је 3Д. Матрична репрезентација базисних вектора је

$$|1,1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1,0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1,-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{3.426}$$

Деловањем оператором $\hat{L}_z$ на базисне векторе

$$\begin{aligned}\hat{L}_z|1,1\rangle &= \hbar|1,1\rangle,\\ \hat{L}_z|1,0\rangle &= 0,\\ \hat{L}_z|1,-1\rangle &= -\hbar|1,-1\rangle\end{aligned} \tag{3.427}$$

налазимо матричну репрезентацију оператора $\hat{L}_z$ у овом базису,

$$\hat{L}_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & -1\end{pmatrix}. \tag{3.428}$$

Репрезентација овог оператора је дијагонална матрица, што је и очекивано пошто је базис својствени за дотични оператор. Слично, деловањем оператора $\hat{L}_+$ на базисне векторе

$$\begin{aligned}\hat{L}_+|1,1\rangle &= 0,\\ \hat{L}_+|1,0\rangle &= \hbar\sqrt{2}|1,1\rangle,\\ \hat{L}_+|1,-1\rangle &= \hbar\sqrt{2}|1,0\rangle,\end{aligned} \tag{3.429}$$

налазимо матричну репрезентацију оператора $\hat{L}_+$,

$$\hat{L}_+ = \hbar\begin{pmatrix} & \sqrt{2} & \\ & & \sqrt{2} \\ & & \end{pmatrix}. \tag{3.430}$$

Аналогно и за $\hat{L}_-$,

$$\begin{aligned}\hat{L}_-|1,1\rangle &= \hbar\sqrt{2}|1,0\rangle,\\ \hat{L}_-|1,0\rangle &= \hbar\sqrt{2}|1,-1\rangle,\\ \hat{L}_-|1,-1\rangle &= 0,\end{aligned} \tag{3.431}$$

$$\hat{L}_- = \hbar\begin{pmatrix} & & \\ \sqrt{2} & & \\ & \sqrt{2} & \end{pmatrix}. \tag{3.432}$$

[20] Како је

$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2}, \quad \hat{L}_y = \frac{\hat{L}_+ - \hat{L}_-}{2i}, \tag{3.433}$$

налазимо матричне репрезентације оператора $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_y$,

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} & 1 & \\ 1 & & 1 \\ & 1 & \end{pmatrix}, \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2i}\begin{pmatrix} & 1 & \\ -1 & & 1 \\ & -1 & \end{pmatrix}. \tag{3.434}$$

[20] Приметимо да између $\hat{L}_+$ и $\hat{L}_-$ постоји веза $\hat{L}_+^\dagger = \hat{L}_-$. Ова веза мора да постоји и између матричих репрезентација ова два оператора, тако да је довољно израчунати матричну репрезентацију једног оператора, а друга се добија када прву репрезентацију ађунгујемо.

б)

I НАЧИН

Средња вредност оператора $\hat{L}_x^2$ у стању $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1,-1\rangle$ је

$\langle\psi|\hat{L}_x^2|\psi\rangle = \frac{1}{4}\langle\psi|\hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2 + \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+|\psi\rangle =$

$$= \frac{1}{4}\Big(\frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1,0| + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1,-1|\Big)\Big(\hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2 + \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+\Big)\Big(\frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1,-1\rangle\Big). \tag{3.435}$$

Ненулти матрични елементи су

$$\begin{aligned} \langle 1,0|\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+|1,0\rangle &= \langle 1,0|\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2|1,0\rangle = 4\hbar^2, \\ \langle 1,-1|\hat{L}_-\hat{L}_+|1,-1\rangle &= 2\hbar^2, \end{aligned} \tag{3.436}$$

тако да је

$$\langle\hat{L}_x^2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2. \tag{3.437}$$

II НАЧИН

Задатак можемо да решимо и матрично.

$$\langle\psi|\hat{L}_x^2|\psi\rangle = |\hat{L}_x|\psi\rangle|^2. \tag{3.438}$$

Како знамо матричну репрезентацију оператора $\hat{L}_x$ (једначина 3.434), када репрезентујемо стање $|\psi\rangle$,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{3.439}$$

добијамо

$$\hat{L}_x|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{3.440}$$

тако да помоћу последње једначине и једначине (3.438) добијамо

$$\langle\hat{L}_x^2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2. \tag{3.441}$$

6. Предвиђен за самосталан рад.

7. Матричну репрезентацију оператора $\hat{L}_x$ у датом базису знамо (једначина 3.434). Ако решимо својствени проблем оператора $\hat{L}_x$ у том базису,

$$\det|\hat{L}_x - \lambda I_{3\times 3}| = 0, \tag{3.442}$$

добијамо својствене вредности $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = -\hbar$ и $\lambda_3 = \hbar$. Сада желимо да нађемо својствена стања. За својствену вредност 0,

$$\frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} & 1 & \\ 1 & & 1 \\ & 1 & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow b = 0, a = -c, \tag{3.443}$$

добијамо својствено стање

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \text{ тј. } \quad |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,1\rangle - |1,-1\rangle). \tag{3.444}$$

Својствена једначина за својствену вредност $-\hbar$ је

$$\frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} & 1 & \\ 1 & & 1 \\ & 1 & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = -\hbar\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \Rightarrow b = -\sqrt{2}a, a = c, \tag{3.445}$$

а својствено стање

$$\psi_{-\hbar} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \text{ тј. } \quad |\psi_{-\hbar}\rangle = \frac{1}{2}(|1,1\rangle - \sqrt{2}|1,0\rangle + |1,-1\rangle). \tag{3.446}$$

8. Честица прелази у стање дато једначином (3.446). Вероватноћа прелаза је

$$\begin{aligned} \omega &= \Big|\langle\psi|\psi_{\hbar}\rangle\Big|^2 = \Big|(\frac{\sqrt{3}}{2}\langle 1,1| + \frac{1}{2}\langle 1,-1|)\frac{1}{2}(|1,1\rangle - \sqrt{2}|1,0\rangle + |1,-1\rangle)\Big|^2 \\ &= \Big|\frac{\sqrt{3}}{4} + \frac{1}{4}\Big|^2 = \frac{2+\sqrt{3}}{8}. \end{aligned} \tag{3.447}$$

9. Хамилтонијан крутог ротатора у равни је

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}_z^2}{2I}. \tag{3.448}$$

Из чињенице да Хамилтонијан и оператор $\hat{L}_z$ комутирају, знамо да они имају заједнички својствени базис

$$\langle\varphi|m\rangle = \psi_{\pm m}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm im\varphi}. \tag{3.449}$$

Својствене енергије крутог ротатора добијамо решавањем Шредингерове једначине

$$H\psi_{\pm m} = E_{\pm}\psi_{\pm m}. \tag{3.450}$$

Како је

$$\hat{L}_z\psi_{\pm m} = \pm m\hbar\psi_{\pm m} \Rightarrow \hat{L}_z^2\psi_{\pm m} = m^2\hbar^2\psi_{\pm m}, \tag{3.451}$$

својствене енергије,

$$E_{\pm m} = \frac{m^2\hbar^2}{2I}, \tag{3.452}$$

су двоструко дегенерисане. Једној истој енергији $\frac{m^2\hbar^2}{2I}$, одговарају два својствена стања ψ_m и ψ_{-m}. Својствене функције су, наравно, нормиране.

10. Стање крутог ротатора у $|\varphi\rangle$ репрезентацији изражено преко базисних стања је

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\psi\rangle = \psi(\varphi, t=0) &= A\Big(\frac{e^{i\varphi+e^{-i\varphi}}}{2}\Big)^3 = \frac{A}{8}(e^{3i\varphi} + e^{-3i\varphi} + e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) \\ &= \frac{A}{8}\sqrt{2\pi}(\psi_3 + 3\psi_1 + 3\psi_{-1} + \psi_{-3}).\end{aligned} \tag{3.453}$$

Из услова нормираности таласне функције на јединицу,

$$\begin{aligned}1 &= \langle\psi|\psi\rangle = \frac{|A|^2}{64}2\pi\big[\langle 3| + 3\langle 1| + 3\langle -1| + \langle -3|\big]\big[|3\rangle + 3|1\rangle + 3|-1\rangle + |-3\rangle\big] \\ &= |A|^2\frac{5\pi}{8},\end{aligned} \tag{3.454}$$

налазимо

$$A = \sqrt{\frac{8}{5\pi}} \Rightarrow \psi(\varphi, t=0) = \sqrt{\frac{1}{20}}(\psi_3 + 3\psi_1 + 3\psi_{-1} + \psi_{-3}). \tag{3.455}$$

Еволуција крутог ротатора у равни је

$$\psi(\varphi, t) = \sqrt{\frac{1}{20}}(\psi_3 e^{-\frac{i}{\hbar}E_3 t} + 3\psi_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + 3\psi_{-1}e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + \psi_{-3}e^{-\frac{i}{\hbar}E_3 t}). \tag{3.456}$$

3.7 Спин

1. *a*)

Простор у коме радимо је 2Д. Матрична репрезентација базисних вектора је

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{3.457}$$

Деловаћемо оператором $\hat{s_z}$ на базисне векторе

$$\begin{aligned}\hat{s_z}|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{2}\hbar|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \\ \hat{s_z}|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= -\frac{1}{2}\hbar|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle.\end{aligned} \tag{3.458}$$

Репрезентацију оператора $\hat{s}_z$ у овом базису је

$$\hat{s}_z = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}. \tag{3.459}$$

Деловањем операторима $\hat{s}_+$ на $\hat{s}_-$ на базисне векторе

$$\begin{aligned}
\hat{s_+}|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle &= 0,\\
\hat{s_+}|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle &= \hbar\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)+\frac{1}{2}(-\frac{1}{2}+1)}|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle = \hbar|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle,\\
\hat{s_-}|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle &= \hbar\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)-\frac{1}{2}(\frac{1}{2}-1)}|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle = \hbar|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle,\\
\hat{s_-}|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle &= 0, \qquad (3.460)
\end{aligned}$$

налазимо њихове репрезентације

$$\hat{s}_+ = \hbar\begin{pmatrix} & 1\\ & \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_- = \hbar\begin{pmatrix} & \\ 1 & \end{pmatrix}. \qquad (3.461)$$

Како је

$$\hat{s}_x = \frac{\hat{s}_+ + \hat{s}_-}{2}, \quad \hat{s}_y = \frac{\hat{s}_+ - \hat{s}_-}{2i}, \qquad (3.462)$$

налазимо матричне репрезентације оператора $\hat{s}_x$ и $\hat{s}_y$

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} & 1\\ 1 & \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} & -i\\ i & \end{pmatrix}. \qquad (3.463)$$

Увођењем Паулијевих $\hat{\sigma}$ матрица

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} & 1\\ 1 & \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} & -i\\ i & \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}, \qquad (3.464)$$

спинске репрезентације се могу написати помоћу $\hat{\sigma}$ матрица на следећи начин

$$\hat{s}_i = \frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_i. \qquad (3.465)$$

Навешћемо пар особина σ матрица

- $\hat{\sigma}_i^2 = 1$,
- $\sum_i \hat{\sigma}_i^2 = 3$,
- $\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = \delta_{ij}I + i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$.

b)

Предвиђен за самосталан рад.

2. Оператор пројекције спина $\hat{\boldsymbol{s}}$ на произвољну осу $\boldsymbol{n}$ је

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{s}}_{\boldsymbol{n}} &= \hat{\boldsymbol{s}}\cdot\boldsymbol{n} = \hat{s}_z\cos\theta + \hat{s}_y\sin\theta\sin\varphi + \hat{s}_x\sin\theta\cos\varphi\\
&= \frac{1}{2}\hbar\cos\theta\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1\end{pmatrix} + \frac{1}{2}\hbar\sin\theta\sin\varphi\begin{pmatrix} & -i\\ i & \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\hbar\sin\theta\cos\varphi\begin{pmatrix} & 1\\ 1 & \end{pmatrix}\\
&= \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}. \qquad (3.466)
\end{aligned}$$

Својствене вредности овог оператора налазимо из једначине

$$\det|\hat{\boldsymbol{s}}_{\boldsymbol{n}} - \lambda I| = 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm\frac{1}{2}\hbar. \tag{3.467}$$

Треба напоменути да својствене вредности овог оператора не зависе од избора осе на коју пројектујемо, дакле, увек бисмо добили својствене вредности $\pm\frac{1}{2}\hbar$. Сада желимо да нађемо својствене векторе. Својсвена једначина за својствену вредност $\frac{1}{2}\hbar$

$$\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{3.468}$$

нам даје систем једначина

$$\begin{aligned} (\cos\theta - 1)a + \sin\theta e^{-i\varphi}b &= 0, \\ \sin\theta e^{i\varphi}a - (\cos\theta + 1)b &= 0, \end{aligned} \tag{3.469}$$

чијим решавањем добијамо својствени вектор

$$|\boldsymbol{n}, \frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix}. \tag{3.470}$$

За својствену вредност $-\frac{1}{2}\hbar$ својствена једначина је

$$\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \tag{3.471}$$

Из система једначина

$$\begin{aligned} (\cos\theta + 1)a + \sin\theta e^{-i\varphi}b &= 0, \\ \sin\theta e^{i\varphi}a - (\cos\theta - 1)b &= 0, \end{aligned} \tag{3.472}$$

добијамо својствени вектор

$$|\boldsymbol{n}, -\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix}. \tag{3.473}$$

3. Вероватноћа да пројекција спина на $\boldsymbol{n}$ осу има вредност $\frac{1}{2}\hbar$[21] је[22]

$$\begin{aligned} v\Big(\frac{1}{2}\hbar,\ \ |\boldsymbol{n}, \frac{1}{2}\rangle\langle\boldsymbol{n}, \frac{1}{2}|,\ \ |+\rangle\Big) &= \langle+|\boldsymbol{n}, \frac{1}{2}\rangle\langle\boldsymbol{n}, \frac{1}{2}|+\rangle \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos^2\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} \\ \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} & \sin^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \cos^2\frac{\theta}{2}. \end{aligned} \tag{3.474}$$

[21] Стање $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ ћемо писати као $|+\rangle$ ради прегледности.

[22] Вероватноћа да добијемо својствену вредност a опсервабле $\hat{A}$ у стању $|\psi\rangle$ је $v(a, \hat{A}, |\psi\rangle) = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$.

Вероватноћа да пројекција спина на $\boldsymbol{n}$ осу има вредност $-\frac{1}{2}\hbar$

$$\begin{aligned} &v\Big(-\frac{1}{2}\hbar,\ |\boldsymbol{n},-\frac{1}{2}\rangle\langle\boldsymbol{n},-\frac{1}{2}|,\ |+\rangle \Big) \\ =&\ \langle+|\boldsymbol{n},-\frac{1}{2}\rangle\langle\boldsymbol{n},-\frac{1}{2}|+\rangle \\ =&\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sin^2\frac{\theta}{2} & -\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} \\ -\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} & \cos^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ =&\ \sin^2\frac{\theta}{2} \end{aligned} \tag{3.475}$$

.

4. Оператор спинске ротације је

$$R_{\boldsymbol{n}}(\alpha) = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha\boldsymbol{S}\boldsymbol{n}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\frac{i}{\hbar}\alpha\boldsymbol{S}\boldsymbol{n})^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\frac{i}{\hbar}\alpha)^n}{n!}(\boldsymbol{S}\boldsymbol{n})^n. \tag{3.476}$$

Како је $\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}\hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, добијамо

$$(\boldsymbol{S}\boldsymbol{n})^n = (\frac{1}{2}\hbar)^n(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{n})^n, \tag{3.477}$$

тако да је оператор ротације једнак

$$R_{\boldsymbol{n}}(\alpha) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\frac{i}{2}\alpha)^n}{n!}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{n})^n. \tag{3.478}$$

Потребно је да упростимо израз $(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{n})^n$. Ако приметимо да је

$$\begin{aligned} (\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{a})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{b}) &= \hat{\sigma}_i a_i\hat{\sigma}_j b_j = \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j a_i b_j = (\delta_{ij}I + i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k)a_i b_j = a_i b_i I + i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k a_i b_j \\ &= \boldsymbol{a}\boldsymbol{b}I + i(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\hat{\sigma}, \end{aligned} \tag{3.479}$$

што се за $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b} = \boldsymbol{n}$ своди на

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{n})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{n}) = I, \tag{3.480}$$

схватамо да је

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{n})^n = \begin{cases} I & \text{за } n = 2k, \\ (\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{n}) & \text{за } n = 2k+1. \end{cases} \tag{3.481}$$

Сада оператор ротације добија облик

$$\begin{aligned} R_{\boldsymbol{n}}(\alpha) &= I\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{(\frac{1}{2}\alpha)^{2k}}{(2k)!} + i(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{n})\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{(\frac{1}{2}\alpha)^{2k+1}}{(2k+1)!} \\ &= I\cos\frac{\alpha}{2} + i(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{n})\sin\frac{\alpha}{2}. \end{aligned} \tag{3.482}$$

Спинска ротација за угао 2π је $R_{\boldsymbol{n}}(2\pi) = -I$, док је за угао 4π $R_{\boldsymbol{n}}(4\pi) = I$.

3.8 Честица у сферно симетричном потенцијалу

1. *а)* Шредингерова једначина за кретање честице у централном потенцијалу је

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)]\psi = E\psi, \tag{3.483}$$

где је лапласијан у сферним координатама

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{L^2}{r^2\hbar^2}, \tag{3.484}$$

а L оператор момента импулса честице који у себи садржи угаону зависност лапласијана. Сада ШЈ изгледа као

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{L^2}{2mr^2} + U(r)]\psi = E\psi. \tag{3.485}$$

Решења тражимо у облику $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)f(\theta,\varphi)$, што нас доводи до израза

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r})f(\theta,\varphi) + \frac{L^2 f(\theta,\varphi)}{2mr^2}R(r) + U(r)R(r)f(\theta,\varphi)] = ER(r)f(\theta,\varphi). \tag{3.486}$$

Када помножимо једначину са $-\frac{2mr^2}{R(r)f(\theta,\varphi)}$ и део који у себи крије угаону зависност пребацимо на другу страну, добићемо диференцијалну једначину која раздваја променљиве

$$\frac{\hbar^2}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}) + 2mr^2(E - U(r)) = \frac{1}{f(\theta,\varphi)}L^2 f(\theta,\varphi). \tag{3.487}$$

Решење постоји само ако су обе стране једнаке истој константи C. Тако се наша диференцијална једначина распада на две независне. Прва је

$$\frac{\hbar^2}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}) + 2mr^2(E - U(r)) = C, \tag{3.488}$$

а друга

$$\frac{1}{f(\theta,\varphi)}L^2 f(\theta,\varphi) = C. \tag{3.489}$$

Друга једначина није ништа друго до својствени проблем оператора L^2, па је јасно да је

$$C = l(l+1)\hbar^2, \quad f(\theta,\varphi) = Y_l^{m_l}(\theta,\varphi). \tag{3.490}$$

Заменом константе C у прву једначину и елементарним трансформацијама долазимо до траженог израза.

б)

$$[H, L^2] = [-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + U(r) + \frac{L^2}{2mr^2}, L^2]. \tag{3.491}$$

Комутатор између прва два сабирка хамилтонијана и L^2 је нула јер живе у различитим просторима стања(прва два сабирка су из 'радијалног', а L^2 је из 'угаоног' простора стања) па се комутатор своди на $[\frac{L^2}{2mr^2}, L^2] = \frac{1}{2mr^2}[L^2, L^2] = 0$. Како H и L^2 комутирају, имају заједнички својствени базис, а то су сферни хармоници. Укупна таласна функција је $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_l^{m_l}$. Када је убацимо у израз (5.3) и искористимо $L^2 Y_l^{m_l} = \hbar^2 l(l+1) Y_l^{m_l}$ добијамо тражени израз.

в) Сменом $R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$ једначина се додатно упрошћава и своди на

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r)]\chi(r) = E\chi(r). \tag{3.492}$$

Ова једначина аналогна је једнодимензионалном проблему у коме се честица масе m креће у ефективном потенцијалу $U_{eff} = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$.

г) У близини $r = 0$ претпоставимо да се $R(r)$ понаша као нека степена функција r^s чији степен s треба одредити

$$R(r) \sim_{r\sim 0} Cr^s \;\; tj. \;\; \chi(r) \sim_{r=0} Cr^{s+1}. \tag{3.493}$$

Заменом овог израза у једначину (5.10) и њеним сређивањем проблем се редукује на

$$\frac{\hbar^2}{2m}(l(l+1) - s(s+1))Cr^{s-1} = (E - V(r))Cr^{s+1}. \tag{3.494}$$

Када поделимо обе стране са r^{s-1} и 'пустимо' $\lim_{r=0}$ десна страна ће бити једнака 0. Лева страна биће једнака нули само ако је

$$s(s+1) = l(l+1) \Rightarrow s = l \vee s = -(l+1). \tag{3.495}$$

Другу могућност морамо да одбацимо због дивергенције таласне функције $R(r)$ у 0, па је

$$R(r) \sim_{r\sim 0} Cr^l, \;\; \chi(r) \sim_{r\sim 0} Cr^{l+1}. \tag{3.496}$$

2. Потенцијал је сферно симетричан и можемо да искористимо претходни задатак. Честица је у s стању ако је $l = 0$. Онда је јасно да је таласна функција облика

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R(r). \tag{3.497}$$

У другој области $V(r) = \infty$ а то заправо значи да је $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r) = 0$ па таласна функција прве области мора да задовољава гранични услов $R(a) = 0 = \chi(a)$. У првој области је $V(r) = 0$ па се једначина (5.10) своди на

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi''(r) = E\chi(r) \;\; tj. \;\; \chi''(r) + \frac{2mE}{\hbar^2}\chi(r) = 0. \tag{3.498}$$

1.случај $E > 0$

Тада је решење једначине $\chi(r) = A\sin kr + B\cos kr$, где је $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. B мора бити једнако 0, у супротном би таласна функција у $r = 0$ дивергирала, па је $R(r) = A\frac{\sin kr}{r}$. Услов $R(a) = 0$ нам даје $\frac{\sin ka}{a} = 0$, а то је задовољено за

$$ka = n\pi, \;\; n = 1, 2, 3... \Rightarrow E = \frac{\hbar^2}{2m}\Big(\frac{n\pi}{a}\Big)^2. \tag{3.499}$$

Нормирањем таласне фукције на јединицу, добијамо коефицијент $A = \sqrt{\frac{1}{2\pi a}}$ и решење је

$$\psi_n(r,\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a}}\frac{\sin\frac{n\pi r}{a}}{r}, \quad E = \frac{\hbar^2}{2m}\Big(\frac{n\pi}{a}\Big)^2. \tag{3.500}$$

2.случај $E \leq 0$

Показати да у овом случају нема решења, осим за $E = 0$.

3.

$$\langle r\rangle = \int_0^a\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\psi_n^*(r,\theta,\varphi)r\psi_n(r,\theta,\varphi)r^2\sin\theta drd\theta d\varphi = \frac{a}{2} \tag{3.501}$$

$$\langle r^2\rangle = \int_0^a\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\psi_n^*(r,\theta,\varphi)r^2\psi_n(r,\theta,\varphi)r^2\sin\theta drd\theta d\varphi = \frac{a^2}{3}(1-\frac{3}{2n^2\pi^2}) \tag{3.502}$$

4. *а)* Како радимо са s стањима ($l = 0$), у угаоном делу решење је сферни хармоник $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$.

I. област Аналогно задатку 2

$$R_I(r) = \frac{1}{r}(C_1\sin kr + C_2\cos kr), \quad E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}. \tag{3.503}$$

Константа C_2 мора бити нула иначе би таласна функција R_I дивергирала.

II. област Увођењем смене $R_{II}(r) = \frac{\chi_{II}(r)}{r}$, Шредингерова једначина у другој области се своди на

$$\chi_{II}''(r) - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\chi_{II}(r) = 0. \tag{3.504}$$

Решење ове једначине је

$$\chi_{II}(r) = C_3e^{\kappa r} + C_4e^{-\kappa r}, \text{ где је } \kappa^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2} > 0. \tag{3.505}$$

Сада можемо наћи таласну функцију $R_{II}(r)$,

$$R_{II}(r) = C_3\frac{e^{\kappa r}}{r} + C_4\frac{e^{-\kappa r}}{r}. \tag{3.506}$$

$R_{II}(r)$ не сме да дивергира у бесконачности, па мора бити $C_3 = 0$.

б) Пре него што решимо задатак продискутоваћемо граничне услове за коначан и бесконачан скок потенцијала. У првом задатку смо закључили да је Шредингерова једначина за $\chi(r)$ представља једнодимензионални проблем и можемо да применимо резултате из квантне механике 1, тј.

$$\chi_I(a) = \chi_{II}(a), \text{ и } \chi_I'(a) = \chi_{II}'(a), \tag{3.507}$$

за коначан скок потенцијала, и

$$\chi_I(a) = \chi_{II}(a), \quad \text{и} \quad \chi_{II}'(a) - \chi_I'(a) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\chi_I(a) \tag{3.508}$$

за скок потенцијала $V(r) = \alpha\delta(r-a)$.

наставак а) Искористићемо резултате да бисмо урадили наш пример. Скок потенцијала је коначан и гранични услови нам дају

$$C_1 \sin ka = C_4 e^{-\kappa a}, \text{ непрекидност таласне функције.} \tag{3.509}$$

$$C_1 k \cos ka = -\kappa C_4 e^{-\kappa a}, \text{ непрекидност извода таласне функције.} \tag{3.510}$$

Када поделимо ове две једначине добијамо дисперзиону релацију

$$-\frac{k}{\kappa} = tgka. \tag{3.511}$$

Ако направимо смену $X = ka$ и $Y = \kappa a$ једначина се своди на

$$-XctgX = Y. \tag{3.512}$$

Како је

$$X^2 + Y^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}, \tag{3.513}$$

(једначина кружнице), решења добијамо у пресеку ове две [23] криве. Минимална вредност V_0 за коју постоји решење је $V_{min} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$.

5. Кулонов потенцијал је $U(r) = -\frac{e^2}{r}$ и Шредингерова једначина за таласну ф-ју $\chi(r)$ изгледа као

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}]\chi(r) = E\chi(r). \tag{3.514}$$

Ако направимо смену $\rho = \frac{r}{a_0}$, где је a_0 - Боров радијус, и искористимо следеће везе константи, $\hbar^2 = me^2a_0$, $E_I = \frac{me^4}{2\hbar^2} = \frac{e^2}{2a_0}$, једначина се може написати у облику

$$[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda^2]\chi(\rho) = 0, \tag{3.515}$$

где је $\lambda^2 = -\frac{E}{E_I}$.

АСИМПТОТСКО ПОНАШАЊЕ: У ∞, термови $\frac{1}{\rho^2}$ и $\frac{1}{\rho}$ су мали у поређењу са λ^2, па их можемо занемарити, и једначина се своди на

$$[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \lambda^2]\chi(\rho) = 0 \tag{3.516}$$

Њена решења су $e^{\pm\rho\lambda}$. Ми желимо да функција $R(\rho) = \frac{\chi(\rho)}{\rho}$ не дивергира у бесконачности, тако да решење $e^{\rho\lambda}$ из тог разлога морамо да одбацимо. Стварно решење једначине тражићемо у облику $\chi(\rho) = e^{-\rho\lambda}y(\rho)$, где је $y(\rho)$ произвољна функција од ρ. Диференцијална једначина чије је решење $y(\rho)$ је

$$[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda^2]e^{-\rho\lambda}y(\rho) = 0. \tag{3.517}$$

[23] Детаљно решавање ове једначине можете наћи у квантној механици 1 - Динамика

Како је $\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}e^{-\rho\lambda}y(\rho) = e^{-\rho\lambda}(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - 2\lambda\frac{\partial}{\partial\rho} + \lambda^2)y(\rho)$, једначина се додатно упрошћава и изгледа као

$$[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - 2\lambda\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}]y(\rho) = 0. \tag{3.518}$$

РЕШЕЊА ТРАЖИМО У ОБЛИКУ СТЕПЕНОГ РЕДА $y = \rho^s \sum_{q=0}^{\infty} C_q\rho^q$, где је, по дефиницији, C_0 први ненулти коефицијент у развоју функције. Због $\frac{d}{d\rho}y = \sum_{q=0}^{\infty}(q+s)C_q\rho^{s+q-1}$ и $\frac{d^2}{d\rho^2}y = \sum_{q=0}^{\infty}(q+s)(q+s-1)C_q\rho^{s+q-2}$, имамо

$$\sum_{q=0}^{\infty}\Big[(q+s)(q+s-1)C_q\rho^{s+q-2} - 2\lambda(q+s)C_q\rho^{s+q-1} + 2C_q\rho^{s+q-1} - l(l+1)C_q\rho^{s+q-2}\Big] = 0 \tag{3.519}$$

Знамо да је неки полином једнак нули ако су му сви коефицијенти у развоју једнаки нули. Коефицијент уз најнижи терм ρ^{s-2} је

$$s(s-1)C_0 - l(l+1)C_0 = 0, \tag{3.520}$$

одакле добијамо два решења, $s = l+1 \wedge s = -l$. Друго решење морамо одбацити, због дивергенције $R(\rho)$ у 0. Веза коефицијената C_q је дата рекурентном релацијом [24]

$$[(q+l)(q+l+1) - l(l+1)]C_q = [2\lambda(q+l) - 2]C_{q-1}, \tag{3.521}$$

која се може представити и као

$$\frac{C_q}{C_{q-1}} = \frac{2[\lambda(q+l) - 1]}{q[q+2l+1]}. \tag{3.522}$$

За довољно велико q, овај количник је мањи од 1, па је низ конвергентан. Доминантан члан у овом количнику за велике вредности q је

$$\frac{C_q}{C_{q-1}} \sim_{q\to\infty} \frac{2\lambda}{q}. \tag{3.523}$$

Израз за степени ред функције $e^{2\rho\lambda}$ је $\sum_{q=0}^{\infty} d_q\rho^q$, где је $d_q = \frac{(2\lambda)^q}{q!}$. Приметимо да је и

$$\frac{d_q}{d_{q-1}} = \frac{2\lambda}{q}. \tag{3.524}$$

Одавде следи да се за велике вредности ρ, низ C_q понаша као $e^{2\rho\lambda}$, што би нам дало да је $R(\rho) \sim \frac{e^{\lambda\rho}}{\rho}$ за велико ρ. То је у контрадикцији са дивергенцијом таласне функције у бесконачности. Закључујемо да низ C_q мора бити коначан, тј. да постоји неки цео број q_{max} после кога су сви остали чланови низа 0. Овај услов остварујемо када је бројилац у изразу (5.40) једнак нули. Тада је

$$\lambda = \frac{1}{q_{max} + l}. \tag{3.525}$$

[24] везу ових коефицијената добијамо из услова да је коефицијент који стоји уз ρ^{q+s-2} једнак нули, и заменом $s = l+1$.

$y(\rho)$ је онда полиномијална функција чији је најнижи терм ρ^{l+1} а највиши ρ^{k+l}. Својствене енергије атома водоника су

$$E = -\frac{E_I}{(q_{max}+l)^2}. \tag{3.526}$$

Ако уведемо нови квантни број, $n = q_{max} + l$, добијамо добро познати израз за енергију атома водоника

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2},\ n = 1, 2, ... \tag{3.527}$$

Љуска којој одговара вредност главног квантног броја n има подљуске l $(l = 0, 1, ..., n-1)$, од којих је свака подљуска $2l+1$ пута дегенерисана, па је укупна дегенерација нивоа

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2\frac{n(n-1)}{2} + n = n^2. \tag{3.528}$$

Урачунавањем спина електрона дегенерација постаје $2n^2$, јер су могуће две пројекције спина $s = 1/2$.

6. *а)* Густина вероватноће да се e^- нађе у делу простора $(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}+d\boldsymbol{r})$ износи

$$dw' = |\psi_{100}|^2 r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr. \tag{3.529}$$

Како је основно стање сферно симетрично, нас једино занима линијска вероватноћа да се e^- нађе у интервалу $(r, r+dr)$, тако да можемо извршимо интеграцију по θ и φ и добијамо

$$\lambda = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi_{100}|^2 r^2 \sin\theta d\theta d\varphi = \frac{4}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2. \tag{3.530}$$

Екстремум линијске вероватноће се добија из услова да је $\frac{d\lambda}{dr} = 0$, који нам даје

$$\frac{4}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} 2r(1 - \frac{r}{a_0}) = 0. \tag{3.531}$$

Екстремуми су у $r = 0$, $r = \infty$ и $r = a_0$. Прва два решења одговарају минимуму, а треће максимуму, па је највероватније растојање електрона од језгра a_0.

б)

$$\langle\frac{1}{r}\rangle_{|100\rangle} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{100}^* \frac{1}{r} \psi_{100} r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr = \frac{1}{a_0}. \tag{3.532}$$

в)

$$\langle\frac{1}{r^2}\rangle_{|100\rangle} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{100}^* \frac{1}{r^2} \psi_{100} r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr = \frac{2}{a_0^2}. \tag{3.533}$$

г)

$$\langle r^k\rangle_{|100\rangle} = \int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\psi_{100}^* r^k \psi_{100} r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr = \frac{a_0^k}{2^{k+1}}(k+2)!. \tag{3.534}$$

д)

$$\langle p_x^2\rangle_{|100\rangle} = \langle 100|p_x p_x|100\rangle = \langle u|u\rangle, \tag{3.535}$$

где је $|u\rangle = p_x|100\rangle$. Како је $p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, а таласна функција нам је изражена у сферним координатама, морамо и p_x да изразимо у сферним координатама. Дакле,

$$p_x = -i\hbar(\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\varphi}). \tag{3.536}$$

Када израчунамо

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \sin\theta\cos\varphi,\ \frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{1}{r}\cos\varphi\cos\theta,\ \frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}. \tag{3.537}$$

p_x у (r,θ,φ) репрезентацији нам постаје

$$p_x = -i\hbar\Big(\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\varphi\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\Big), \tag{3.538}$$

па је

$$u(r,\theta,\varphi) = p_x(r,\theta,\varphi)\psi_{100}(r,\theta,\varphi) = i\hbar\sin\theta\cos\varphi\frac{1}{a_0}\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}. \tag{3.539}$$

Коначно, решење овог проблема је

$$\langle u|u\rangle = \int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} u^*(r,\theta,\varphi)u(r,\theta,\varphi)r^2\sin\theta d\theta d\varphi dr = \frac{\hbar^2}{3a_0^2} = \frac{e^2}{2a_0}. \tag{3.540}$$

ђ)

$$\langle U(r)\rangle_{|100\rangle} = \langle -\frac{e^2}{r}\rangle_{|100\rangle} = -e^2\langle\frac{1}{r}\rangle_{100} = -\frac{e^2}{a_0} = 2E_1, \tag{3.541}$$

где је $\langle H\rangle_{|100\rangle} = E_1 = -\frac{e^2}{2a_0}$, својствена енергија хамилтонијана која одговара главном квантном броју $n = 1$.

е)

$$\langle T\rangle_{|100\rangle} = \langle H - U\rangle_{|100\rangle} = E_1 - 2E_1 = -E_1. \tag{3.542}$$

7.

$$\textit{КЛАСИЧНО: } H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2). \tag{3.543}$$

Увешћемо нове промењљиве тако да се кретање две честице може изразити помоћу кретања *центра масе*, који се креће као честица масе $M = m_1 + m_2$, импулса $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2$ и налази се у атомској позицији $\boldsymbol{R} = \frac{m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1+m_2}$, и кретања *релативне честице* масе $m = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$, која се налази у $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_1$, и креће се брзином која одговара релативној брзини прве честице у односу на другу $\boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{p}_1}{m_1} - \frac{\boldsymbol{p}_2}{m_2}$. Одавде је релативни импулс $\boldsymbol{p} = \frac{m_2\boldsymbol{p}_1 - m_1\boldsymbol{p}_2}{m_1+m_2}$, и Хамилтонијан можемо да препишемо у облику

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M} + V(r). \tag{3.544}$$

Ако желимо да квантујемо овај систем, *прво морамо да проверимо Поасонове заграде*, тј. да ли је $\{r_i, p_j\}_{pz} = \delta_{ij}$, $\{R_i, P_j\}_{pz} = \delta_{ij}$, $\{R_i, p_j\}_{pz} = 0$, $\{r_i, P_j\}_{pz} = 0$. како су ове релације задовољене, можемо да извршимо квантизацију

$$\boldsymbol{r} \to \hat{\boldsymbol{r}},\ \boldsymbol{R} \to \hat{\boldsymbol{R}},\ \boldsymbol{p} \to -i\hbar\nabla_{\hat{\boldsymbol{r}}},\ \boldsymbol{P} \to -i\hbar\nabla_{\hat{\boldsymbol{R}}}. \tag{3.545}$$

Ове опсервабле задовољавају стандардне комутационе релације

$$[r_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij},\ [R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}. \tag{3.546}$$

Квантни хамилтонијан је једнак

$$H = H_r + H_R = \big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + V(r)\big) + \big(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R\big), \tag{3.547}$$

а Шредингерова једначина

$$\Big[\big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + V(r)\big) + \big(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R\big)\Big]\psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{R}) = E\psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{R}). \tag{3.548}$$

Таласна функција се може факторизовати као $\psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{R}) = \Phi(\boldsymbol{r})\Phi(\boldsymbol{R})$, тако да се Шредингерова једначина може раставити на две независне једначине

$$\big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + V(r)\big)\Phi(\boldsymbol{r}) = E_r\Phi(\boldsymbol{r}),\ \text{и} \tag{3.549}$$

$$\big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_R\big)\Phi(\boldsymbol{R}) = E_R\Phi(\boldsymbol{R}). \tag{3.550}$$

Прва једначина представља кретање честице у централном потенцијалу, а друга кретање слободне честице. Укупна енергија двочестичог система је

$$E = E_r + E_R. \tag{3.551}$$

3.9 Честица у електромагнетном пољу

1. Оператор брзине је једнак

$$\boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})}{m} \tag{3.552}$$

a)

$$[x_i, v_j] = \frac{1}{m}[x_i, p_j - qA_j(x)] = \frac{1}{m}[x_i, p_j] - q[x_i, A_j(x)] = \frac{i\hbar}{m}\delta_{ij} \tag{3.553}$$

Комутатор $[x_i, A_j(x)] = 0$ из чињенице да је комутатор између x и било које функције од x једнак нули.

б)

$$[v_i, v_j]f(x) = \frac{1}{m^2}[p_i - qA_i(x), p_j - qA_j(x)]f(x) \tag{3.554}$$

$$\begin{aligned} &= [p_i, p_j]f(x) - \frac{q}{m^2}[p_i, A_j(x)]f(x) \\ &- \frac{q}{m^2}[A_i, p_j(x)]f(x) + \frac{q^2}{m^2}[A_i(x), A_j(x)]f(x) \end{aligned} \tag{3.555}$$

Функција $f(x)$ је произвољна функција и ми гледамо деловање комутатора на њу. Први и четврти комутатор у формули (5.73) су једнаки нули, и ако заменимо $p_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}$ и $p_j = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}$ комутатор постаје

$$\begin{aligned} [v_i, v_j]f(x) &= -\frac{q}{m^2}\Big([-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}, A_j(x)] + [i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}, A_i(x)]\Big)f(x) \\ &= -\frac{q}{m^2}\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}(A_j(x)f) + i\hbar A_j(x)\frac{\partial f}{\partial x_i}\Big) \\ &- \frac{q}{m^2}\Big(+i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}(A_i(x)f) - i\hbar A_i(x)\frac{\partial f}{\partial x_j}\Big) \end{aligned} \tag{3.556}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{i\hbar q}{m^2}\Big(\frac{\partial A_j}{\partial x_i}f + \frac{\partial f}{\partial x_i}A_j - \frac{\partial f}{\partial x_i}A_j - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}f - A_i\frac{\partial f}{\partial x_j} + A_i\frac{\partial f}{\partial x_j}\Big) \\ &= \frac{i\hbar q}{m^2}\Big(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\Big)f \\ &= \frac{i\hbar q}{m^2}\epsilon_{ijk}B_k f \end{aligned} \tag{3.557}$$

Одавде видимо да је

$$[v_i, v_j] = \frac{i\hbar q}{m^2}\epsilon_{ijk}B_k \tag{3.558}$$

2. Временски зависна Шредингерова једначина и њој конјугована једначина за кретање честице у магнетном пољу је:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\Big[(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - q\boldsymbol{A})^2\Big]\psi + e\varphi\psi \tag{3.559}$$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \frac{1}{2m}\Big[(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - q\boldsymbol{A})^2 + e\varphi\Big]^*\psi^* \tag{3.560}$$

Ако прву једначину помножимо са ψ^* са десне стране, а другу са ψ са леве стране, и онда прву једначину одузмемо од друге, добијамо

$$\begin{aligned} i\hbar\Big(\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^* + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\Big) &= \frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\psi)\psi^* + \frac{iq\hbar}{2m}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{\nabla}\psi)\psi^* + \frac{iq\hbar}{2m}\boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{A}\psi)\psi^* + q\varphi\psi\psi^* \\ &- \frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\psi^*)\psi + \frac{iq\hbar}{2m}\boldsymbol{A}\psi(\boldsymbol{\nabla}\psi^*) + \frac{iq\hbar}{2m}\psi\boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{A}\psi^*) - q\varphi\psi\psi^* \end{aligned}$$

Овај израз се може даље упростити када делујемо оператором $\boldsymbol{\nabla}$ али и када приметимо да је $\boldsymbol{\nabla A} = 0$ јер радимо у Кулоновој калибрацији

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Big(\psi\psi^*\Big) \quad = \quad \frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\psi\psi^* - \psi\Delta\psi^*) + \frac{iq\hbar}{2m}\Big(2\boldsymbol{A\nabla}\psi\psi^* + 2\boldsymbol{A\nabla}\psi\psi^*\Big) \tag{3.561}$$

Ако уведемо величине

$$\rho = \psi\psi^* \ \text{ и } \ \boldsymbol{j} = -\frac{\hbar}{2mi}\Big(\boldsymbol{\nabla}\psi\psi^* - \psi\boldsymbol{\nabla}\psi^* + \frac{2iq\boldsymbol{A}}{\hbar}\psi\psi^*\Big) \tag{3.562}$$

једначина (5.79) се може представити у облику

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla j} = 0 \tag{3.563}$$

што представља *једначину континуитета.*

3. Радимо у Кулоновој калибрацији, за коју важи $\boldsymbol{\nabla A} = 0$, и сматрамо да је $\varphi = 0$ а веза магнетног поља и векторског потенцијала се може представити на два начина: као $\boldsymbol{B} = rot\boldsymbol{A}$ или $\boldsymbol{A} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B}$.

   Хамилтонијан честице у електромагнетном пољу је

$$H = \frac{1}{2m}\Big(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}\Big)^2 + q\varphi = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \frac{q^2}{2m}\boldsymbol{A}^2 - \frac{q}{m}\boldsymbol{pA} \tag{3.564}$$

   Ако претпоставимо да је $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$, квадрат векторског потенцијала нам постаје $\boldsymbol{A}^2 = \frac{1}{4}(x^2+y^2)B^2$, а $\boldsymbol{pA} = -\frac{1}{2}(yp_x - xp_y)B = \frac{1}{2}L_zB$, где је L_z- z компонента момента импулса.

   Ако уведемо Боров магнетон $\mu_b = \frac{e\hbar}{2m}$, наш хамилтонијан постаје

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \frac{q^2}{8m}(x^2+y^2)B^2 - \mu_B\frac{L_z}{\hbar}B \tag{3.565}$$

   Први члан представља хамилтонијан слободне честице, а друга два су корекције због интеракције честице са магнетним пољем.

   Како је $\boldsymbol{p}^2 = -\hbar^2\Big(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\Big)$, $\quad x^2+y^2 = \rho^2$, и $L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ ми хамилтонијан можемо да прикажемо у цилиндричним координатама, а својствене функције ћемо тражити у облику $A(z)B(\varphi)\chi(\rho)$.

   Можемо да проверимо да је $[H, L_z] = 0$, што значи да они имају заједнички својствени базис[25], тј. $B(\varphi) = e^{i\lambda\varphi}$.

   Слично, $[H, p_z] = 0$, па и они имају заједнички својствени базис[26], тј. $A(z) = e^{ikz}$, па је својтвена фукција хамилтонијана облика $e^{ikz}e^{i\lambda\varphi}\chi(\rho)$.

[25] Својствене функције L_z су облика $e^{i\lambda\varphi}$, где λ може бити само целобројан

[26] Својствене функције z-компоненте импулса су равни таласи e^{ikz}

4. *а)* Шредингерова једначина гласи

$$\frac{1}{2m}\Big[p_x^2 + (p_y - qBx)^2 + p_z^2\Big]\psi = E\psi \tag{3.566}$$

што се добија расписивањем једначине (5.83) по компонентама имајући у виду да $\boldsymbol{A}$ има само y компоненту.

$$[H, p_z] = \frac{1}{2m}[p_z^2, p_z] = 0 \tag{3.567}$$

,јер се своди на комутатор $[A^2, A]$, а то је 0 за било који комутатор A. Остале чланове хамилтонијана нисмо разматрали јер су оператори x, p_x и p_y у другим просторима стања, па је њихов комутатор са p_z једнак 0.На основу овога закључујемо да H и p_z имају заједнички својствени базис, а то су равни таласи $e^{ik_z z}$.

$$[H, p_y] = \frac{1}{2m}[p_y^2 - 2Bxqp_y, p_y] = 0 \tag{3.568}$$

,јер је $[p_y^2, p_y] = [p_y, p_y] = 0$, па H и p_y имају заједнички својствени базис, равне таласе облика $e^{ik_y y}$.

$$\begin{aligned} [H, p_x] &= \frac{1}{2m}[p_x^2 + B^2x^2q^2 - 2p_yxqB, p_x] \\ &= \frac{q^2B^2}{2m}[x^2, p_x] - \frac{p_yqB}{m}[x, p_x] \\ &= \frac{i\hbar q^2B^2x}{m} - \frac{i\hbar qBp_y}{m} \neq 0 \end{aligned} \tag{3.569}$$

У претходном комутатору смо искористили $[x, p_x] = i\hbar$ и $[x^2, p_x] = 2i\hbar x$, а претходна једначина нам говори да хамилтонијан и x- компонента оператора импулса не комутирају, па је x- компонента таласне функције нека произвољна функција $f(x)$ коју морамо наћи на другачији начин.

Укупна таласна функција ψ је облика

$$\psi(x, y, z) = f(x)e^{ik_y y}e^{ik_z z} \tag{3.570}$$

Када је уврстимо у Шредингерову једначину и искористимо да је

$$p_a e^{ik_a a} = \hbar k_a, \;\; \text{и} \;\; p_a^2 e^{ik_a a} = \hbar^2 k_a^2, \;\; \text{за} \;\; a = x, y, z. \tag{3.571}$$

ШЈ добија облик

$$\Big[\frac{p_x^2}{2m} + \frac{q^2B^2}{2m}x^2 - \frac{q\hbar Bk_y}{m}x + \frac{\hbar^2k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2k_z^2}{2m}\Big]f(x) = Ef(x) \tag{3.572}$$

Ако напишемо прва три члана хамилтонијана у облику

$$\frac{p_x^2}{2m} + \frac{q^2B^2}{2m}(\frac{\hbar k_y}{qB} - x)^2 + \frac{\hbar^2k_y^2}{2m} \tag{3.573}$$

и направимо смену $x_0 = \hbar k_y/qB$ и $\omega_c = qB/m$, једначина постаје

$$\Big[\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c^2(x_0 - x)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\Big]f(x) = Ef(x) \tag{3.574}$$

Трећи члан ћемо пребацити на десну страну и добијамо

$$\Big[\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c^2(x_0 - x)^2\Big]f(x) = \Big[E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\Big]f(x) \tag{3.575}$$

Ова једначина представља једначину квантног ЛХО, па је својствена функција заправо Хермитов полином $f_x = H_n(x - x_0)$, а својствена енергија $E - \hbar^2 k_z^2/2m = \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})$.
На крају закључујемо

$$\psi(x, y, z) = H_n(x - x_0)e^{ik_y y}e^{ik_z z}, \;\; E = \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \tag{3.576}$$

5. Претпоставићемо да је магнетно поље усмерено дуж z-осе, док је електрично поље дуж x-осе. Магнетно поље задајемо кроз векторски потенцијал $\boldsymbol{A} = B(0, x, 0)$, док ћемо скаларни потенцијал задати као $\varphi = -Ex$. Хамилтонијан је једнак

$$H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 + eEx = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + (\frac{p_x^2}{2m} + \frac{e^2B^2}{2m}x^2 - \frac{eBxp_y}{m} + eEx). \tag{3.577}$$

Као и у претходном задатку, Хамилтонијан комутира са операторима p_z и p_y, тако да ћемо својствену функцију тражити у облику $\psi(x, y, z) = \psi(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y y}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_z z}$. Шредингерова једначина $H\psi(x, y, z) = \epsilon\psi(x, y, z)$, где је ϵ енергија, се трансформише у

$$\Big(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{e^2B^2x^2}{2m} + x(eE - \frac{eB\hbar k_y}{m}) + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - \epsilon\Big)\psi(x) \;=\; 0. \tag{3.578}$$

Дефинисаћемо $\omega_c = eB/m$ и $x_0 = (B\hbar k_y - Em)/eB^2$. Користећи ове константе, Шредингерову једначину ћемо написати у форми ЛХО,

$$(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c^2(x - x_0)^2)\psi(x) = (\epsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{mE^2}{2B^2} - \frac{\hbar k_y E}{B})\psi(x). \tag{3.579}$$

Сада је лако закључити да је $\psi(x) = H_n(x - x_0)$, док је енергија једнака

$$\epsilon_{n,k_z,k_y} = \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{\hbar k_y E}{B} - \frac{mE^2}{2B^2}. \tag{3.580}$$

6. Хамилтонијан електрона је једнак

$$H = \frac{1}{2M}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 + \frac{1}{2}M\omega_0^2(x^2 + y^2). \tag{3.581}$$

Изабраћемо симетричан гејџ векторског потенцијала $\boldsymbol{A} = (-\frac{1}{2}yB, \frac{1}{2}xB, 0)$ и $e = -|e|$. Шредингерова једначина има облик

$$-\frac{\hbar^2}{2M}(\frac{\partial^2\psi}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial\psi}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2})-\frac{\mathrm{i}eB\hbar}{2M}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}+(\frac{e^2B^2\rho^2}{8M}+\frac{1}{2}M\omega_0^2\rho^2-E)\psi = 0. \quad (3.582)$$

Како важи $[H, L_z] = 0$, можемо да раздвојимо променљиве и својствене функције да тражимо у облику $\psi = f(\rho)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-im_l\varphi}$. Радијална једначина је једнака

$$-\frac{\hbar^2}{2M}(\frac{d^2f}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{df}{d\rho}-\frac{m_l^2}{\rho^2}f)-\frac{eB\hbar}{2M}m_lf+(\frac{e^2B^2\rho^2}{8M}+\frac{1}{2}M\omega_0^2\rho^2-E)f = 0. \quad (3.583)$$

Дефинисаћемо циклотронску фреквенцију $\omega_c = \frac{eB}{M} = \frac{\hbar}{M}\ell_0^2$ и магнетну дужину $\ell_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$. Радијална једначина сада има форму

$$\frac{\hbar^2}{2M}(f''+\frac{f'}{\rho}-\frac{m_l^2f}{\rho^2})+[E-\frac{1}{8}M(\omega_c^2+4\omega_0^2)\rho^2+\frac{1}{2}\hbar\omega_cm_l]f = 0. \quad (3.584)$$

Након дефинисања $b = \sqrt{1+\frac{4\omega_0^2}{\omega_c^2}}$ и нове варијабле $x = \frac{M\omega_cb}{2\hbar}\rho^2 = \frac{b\rho^2}{2\ell_0^2}$ имамо

$$xf''+f'-\frac{m_l^2f}{4x}+[\frac{E}{\hbar\omega_cb}-\frac{1}{4}x+\frac{m_l}{2b}]f = 0. \quad (3.585)$$

Једноставнију форму претходне једначине добијамо уколико дефинишемо $\beta = \frac{E}{\hbar\omega_cb}+\frac{m_l}{2b}$,

$$xf''+f'+[\beta-\frac{1}{4}x-\frac{m_l^2}{4x}]f = 0. \quad (3.586)$$

Асимптоцко понашање у $x\to\infty$ нам даје једначину

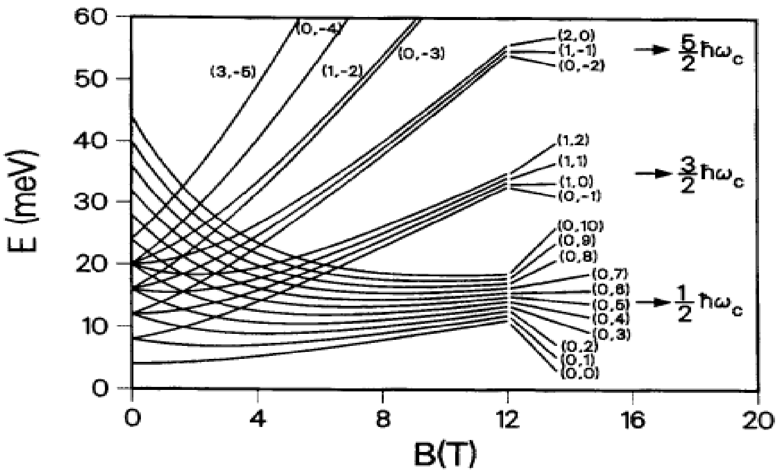
$$xf''-\frac{1}{4}xf = 0 \quad (3.587)$$

чија су решења $e^{\pm\frac{1}{2}x}$. Решење са плусом одбацујемо због дивергенције у бесконачности. Генерално решење ћемо тражити у форми $f = e^{-\frac{x}{2}}u(x)$. Наравно, сматрамо да је функција $u(x)$ конвергентна у $x\to 0$. Настављајући ову процедуру (асимптотски развој у ред) добијају се својствене енергије

$$\begin{aligned} E_{nm_l} &= \frac{1}{2}\hbar\omega_c[b(2n+|m_l|+1)-m_l] \quad (3.588)\\ &= (2n+|m_l|+1)\hbar\sqrt{\frac{1}{4}\omega_c^2+\omega_0^2}-\frac{1}{2}\hbar\omega_cm_l\\ &= (2n+|m_l|+1)\hbar\Omega-\frac{1}{2}\hbar\omega_cm_l, \end{aligned}$$

где је $\Omega = \sqrt{\frac{1}{4}\omega_c^2+\omega_0^2}$. енергија зависи од два квантне броја $n = 0, 1, 2...$ и $m_l = 0, \pm1, ...$ Енергетски спектар за $\hbar\omega_0 = 4meV$ је приказан на слици. Енергетски спректар за $B = 0$, тј. за $\omega_c = 0$ је

$$E_{nm_l} = (2n+|m_l|+1)\hbar\omega_0. \quad (3.589)$$



СЛИКА 3.1: Енергетски нивои електрона у параболичном потенцијалу дати у односу на јачину магнетног поља. Нивои су изначени помоћу два квантна броја (n, m_l) за величину потенцијала $\hbar\omega_0 = 4meV$.

Слично, за велико B , $\omega_c \gg \omega_0$ имамо

$$n = 0, \;\; l \geq 0; \qquad E = \frac{1}{2}\hbar\omega_c, \tag{3.590}$$

$$n = 1, \;\; l \geq 0; \qquad E = \frac{3}{2}\hbar\omega_c.$$

што значи да у одсуству аксијално симетричног потенцијала енергије за позитивно m_l не зависе од њега, али у присуству енергије расту са повећањем m_l.

7. Како је једини ефекат магнетне интеракције интеракција са магнетним моментом електрона $\boldsymbol{\mu}_B = \mu_B \boldsymbol{L}/\hbar$, магнетни допринос хамилтонијану је $-\boldsymbol{\mu}_B \boldsymbol{B}$ па он сада изгледа

$$H = H_0 - \boldsymbol{\mu}_B \boldsymbol{B}. \tag{3.591}$$

Ако је $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$, добијамо

$$H = H_0 - \mu_B \frac{L_z}{\hbar} B \tag{3.592}$$

Знамо да је базис хамилтонијана атома водоника H_0 једнак [27]

$$\langle r, \theta, \varphi | n, l, m\rangle = R_{n,l}(r) Y_l^m, \tag{3.593}$$

и он је својствени за L_z јер у себи садржи сферне хармонике[28],тако да на крају закључујемо да је

$$(H_0 - \mu_B \frac{L_z}{\hbar} B)|n, l, m\rangle = (E_0 - \mu_B B m)|n, l, m\rangle \tag{3.594}$$

[27] Овај израз представља стандардни базис атома водоника (он зависи од три квантна броја n, l и m)у координатној репрезентацији

[28] Знамо да је $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$

тако да је једини ефекат овакве магнетне интеракције цепање енергетских нивоа атома водоника.

8. Хамилтонијан интеракције спинског магнетног момента са магнетним пољем је једнак

$$H = -\boldsymbol{\mu}_s \boldsymbol{B}. \tag{3.595}$$

Спински магнетни момент је једнак

$$\boldsymbol{\mu}_s = g\frac{e}{2m}\boldsymbol{S} = \frac{g}{2}\frac{e\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma} = \frac{g}{2}\mu_B\boldsymbol{\sigma} = \mu_B\boldsymbol{\sigma}, \tag{3.596}$$

где је g- Ландеов фактор и за електрон је приближно једнак 2.

Користили смо и идентитете $\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ и $\mu_B = e\hbar/2m$, што нас је довело до горе приказаног резултата.

За $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$, хамилтонијан честице можемо да прикажемо као

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{2}{\hbar}\mu_B B S_z \tag{3.597}$$

$[H, \boldsymbol{p}] = 0$ па је својствена функција хамилтонијана која одговара орбиталном делу простора стања раван талас

[29]

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \tag{3.598}$$

$[H, S_z] = 0$, и својствена функција хамилтонијана која одговара спинском делу простора стања је [30]

$$\chi_{S_z=\pm 1/2} \tag{3.599}$$

Својствена функција и својствена енергија неутрона је

$$\psi(\boldsymbol{r}, S_z) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathrm{p}\cdot\mathrm{r}/\hbar}\chi_{S_z}, \quad \text{и} \quad E_{p,\pm 1/2} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \mp \mu_B B \tag{3.600}$$

9. Векторски потенцијал ћемо задати као $\boldsymbol{A} = B/2(-y, x, 0)$. Укупан Хамилтонијан можемо написати као збир два независна Хамилтонијана,

$$H = \left(\frac{1}{2m}\big((p_x - eA_x)^2 + (p_y - eA_y)^2\big) + \frac{1}{2}m\omega_0^2(x^2+y^2) + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 z^2\right) = H_1 + H_{lho}, \tag{3.601}$$

где је $H_1 = \frac{1}{2m}\big((p_x - eA_x)^2 + (p_y - eA_y)^2\big) + \frac{1}{2}m\omega_0^2(x^2 + y^2)$ исти Хамилтонијан као и у задатку 6, док је $H_{lho} = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 z^2$ Хамилтонијан ЛХО. Како су ова два Хамилтонијана независна тј. делују у различитим просторима стања, својствена функција H је једнака производу својствених функција Хамилтонијана H_1 (погледајте задатак 6) и H_{lho}, док је енергија једнака збиру својствених енергија оба Хамилтонијана.

[29]Својствена функција векторског оператора импулса $\boldsymbol{p}$ је раван талас у три димензије. То је смисао једначине (5.102)

[30]Својствене функције оператора S_z су $\chi_{1/2} = \boxed{\begin{matrix}1\\0\end{matrix}}$ и $\chi_{-1/2} = \boxed{\begin{matrix}0\\1\end{matrix}}$ за својствене вредности $1/2\hbar$ и $-1/2\hbar$.

10. На основу задатка (7.2) својствени вектор оператора $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}$ за својствену вредност $\hbar/2$ је

$$|\boldsymbol{n},1/2\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}|-\rangle. \tag{3.602}$$

Хамилтонијан интеракције спина са магнетним пољем дуж z-осе је

$$H = -\frac{eg}{2m}B_zS_z = \frac{|e|B_z}{m}S_z = \omega_0 S_z, \tag{3.603}$$

где је $\omega_0 = |e|B_z/m$. Својствени проблем Хамилтонијана је

$$\begin{aligned} H|+> &= \frac{\hbar\omega_0}{2}|+\rangle, \\ H|-> &= -\frac{\hbar\omega_0}{2}|-\rangle. \end{aligned} \tag{3.604}$$

У почетном тренутку су средње вредности оператора S_z, S_x и S_y су

$$\begin{aligned} \langle\boldsymbol{n},1/2|S_z|\boldsymbol{n},1/2\rangle &= \frac{\hbar}{2}\cos\theta, \\ \langle\boldsymbol{n},1/2|S_x|\boldsymbol{n},1/2\rangle &= \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\varphi, \\ \langle\boldsymbol{n},1/2|S_y|\boldsymbol{n},1/2\rangle &= \frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin\varphi. \end{aligned} \tag{3.605}$$

Еволуција таласне функције $|\boldsymbol{n},1/2\rangle$ под дејством хамилтонијана H је

$$|\boldsymbol{n}(t),1/2\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t/2}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t/2}|-\rangle. \tag{3.606}$$

Знајући таласну функцију у произвољном временском тренутку t, можемо да израчунамо средње вредности оператора спина,

$$\begin{aligned} \langle\boldsymbol{n}(t),1/2|S_z|\boldsymbol{n}(t),1/2\rangle &= \frac{\hbar}{2}\cos\theta, \\ \langle\boldsymbol{n}(t),1/2|S_x|\boldsymbol{n}(t),1/2\rangle &= \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos(\varphi+\omega_0 t), \\ \langle\boldsymbol{n}(t),1/2|S_y|\boldsymbol{n}(t),1/2\rangle &= \frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin(\varphi+\omega_0 t). \end{aligned} \tag{3.607}$$

3.10 Слагање угаоних момената

1. Простор у коме радимо је тензорски производ простора стања сваке честице. Како су простори стања обе честице 2Д, укупан простор стања је 4Д и ортонормирани базис $\{|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle\}$ је састављен од вектора [31]:

$$\{|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle\} = \{|+,+\rangle, |+,-\rangle, |-,+\rangle, |-,-\rangle\} \tag{3.608}$$

[31] $|+\rangle = |\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle, |-\rangle = |\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$

Овај базис чине својствена стања оператора s_1^2, s_2^2, s_{1z}, s_{2z}

$$s_1^2|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle,$$

$$s_2^2|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle,$$

$$s_{1z}|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle = \epsilon_1\frac{\hbar}{2}|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle,$$

$$s_{2z}|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle = \epsilon_2\frac{\hbar}{2}|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle. \tag{3.609}$$

s_1^2, s_2^2, s_{1z} и s_{2z} чине КСКО[32].

Дефинисаћемо укупан спин система $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2$. Како важи

$$\begin{aligned} [S_i, S_j] &= [s_{1i} + s_{2i}, s_{1j} + s_{2j}] = [s_{1i}, s_{1j}] + [s_{2i}, s_{2j}] \\ &= i\hbar\epsilon_{ijk}s_{1k} + i\hbar\epsilon_{ijk}s_{2k} = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k, \end{aligned} \tag{3.610}$$

$\boldsymbol{S}$ је угаони момент јер његове компоненте задовољавају стандардне комутационе релације.

Коришћењем идентитета $\boldsymbol{S}^2 = \boldsymbol{s}_1^2 + \boldsymbol{s}_2^2 + 2\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2$ закључујемо да важи

$$[\boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{s}_1^2] = 0,$$

$$[\boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{s}_2^2] = 0. \tag{3.611}$$

Такође, ако израчунамо следеће комутаторе

$$\begin{aligned} [\boldsymbol{S}^2, s_{1z}] &= [\boldsymbol{s}_1^2 + \boldsymbol{s}_2^2 + 2\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2, s_{1z}] = 2[\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2, s_{1z}] \\ &= 2[s_{1x}s_{2x} + s_{1y}s_{2y} + s_{1z}s_{2z}, s_{1z}] = 2s_{2x}[s_{1x}, s_{1z}] + 2s_{2y}[s_{1y}, s_{1z}] \\ &= -2i\hbar s_{1y}s_{2x} + 2i\hbar s_{1x}s_{2x}, \end{aligned} \tag{3.612}$$

$$\begin{aligned} [\boldsymbol{S}^2, s_{2z}] &= [\boldsymbol{s}_1^2 + \boldsymbol{s}_2^2 + 2\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2, s_{2z}] = 2[\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2, s_{2z}] \\ &= 2[s_{1x}s_{2x} + s_{1y}s_{2y} + s_{1z}s_{2z}, s_{2z}] = 2s_{1x}[s_{2x}, s_{2z}] + 2s_{1y}[s_{2y}, s_{2z}] \\ &= -2i\hbar s_{1x}s_{2y} + 2i\hbar s_{1y}s_{2x}, \end{aligned} \tag{3.613}$$

закључујемо да важи

$$[\boldsymbol{S}^2, S_z] = 0. \tag{3.614}$$

Дакле, променили смо КСКО, од опсервабли $\boldsymbol{s}_1^2$, $\boldsymbol{s}_2^2$, s_{1z} и s_{2z} смо прешли на $\boldsymbol{s}_1^2$, $\boldsymbol{s}_2^2$, $\boldsymbol{S}^2$ и S_z.

Ако означимо нови базис као $\{|S,M\rangle\}$, он мора да задовољава

$$\vec{S}^2|S,M\rangle = \hbar^2 S(S+1)|S,M\rangle,$$

[32]прве две опсервабле су заправо идентични оператори помножени фактором $\frac{3}{4}\hbar^2$

$$S_z|S,M\rangle = M\hbar|S,M\rangle,$$
$$\boldsymbol{s}_1^2|S,M\rangle = \boldsymbol{s}_2^2|S,M\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|S,M\rangle. \tag{3.615}$$

Како је $\boldsymbol{S}$ угаони момент, S мора бити позитивно и узимати целе или полуцеле вредности, док M узима вредности од $-S$ до S са кораком 1.

Ми желимо да изразимо нови базис, својствени за s_1^2, s_2^2, $\boldsymbol{S}^2$ и S_z преко старог базиса. Са s_1^2 и s_2^2 немамо проблема: сви вектори из простора стања су њихови својствени вектори за својствену вредност $\frac{3}{4}\hbar^2$.[33]

За оператор S_z базис $\{|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle\}$ је својствени

$$S_z|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle = \frac{1}{2}(\epsilon_1+\epsilon_2)\hbar|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle, \tag{3.616}$$

$\Rightarrow |\epsilon_1,\epsilon_2\rangle$ је својствено стање оператора S_z за својсвену вредност $M = \frac{1}{2}(\epsilon_1+\epsilon_2)$. Вредност квантног броја M може бити 1, 0 или -1.

Својствене вредности $M = 1, -1$ су недегенерисане, њима одговарају својствени вектори $|++\rangle$ и $|--\rangle$, редом. Својствене вредност $M = 0$ је двоструко дегенерисана; њој одговарају ортогонални својствени вектори $|-+\rangle$ и $|+-\rangle$. Било која линеарна комбинација ова два вектора је својствено стање оператора S_z за својствену вредност 0.

Репрезентација S_z у базису $\{|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle\}$ је

$$S_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{3.617}$$

Како је

$$\boldsymbol{S}^2 = \boldsymbol{s}_1^2 + \boldsymbol{s}_2^2 + 2\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2 = \boldsymbol{s}_1^2 + \boldsymbol{s}_2^2 + 2s_{1z}s_{2z} + s_{1+}s_{2-} + s_{1-}s_{2+}, \tag{3.618}$$

лако налазимо да важи

$$\boldsymbol{S}^2|++\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|++\rangle + \frac{3}{4}\hbar^2|++\rangle + \frac{1}{2}\hbar^2|++\rangle = 2\hbar^2|++\rangle,$$
$$\boldsymbol{S}^2|+-\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|+-\rangle + \frac{3}{4}\hbar^2|+-\rangle - \frac{1}{2}\hbar^2|+-\rangle + \hbar^2|-+\rangle = \hbar^2[|+-\rangle + |-+\rangle,$$
$$\boldsymbol{S}^2|-+\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|-+\rangle + \frac{3}{4}\hbar^2|-+\rangle - \frac{1}{2}\hbar^2|-+\rangle + \hbar^2|+-\rangle = \hbar^2[|+-\rangle + |-+\rangle,$$
$$\boldsymbol{S}^2|--\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|--\rangle + \frac{3}{4}\hbar^2|--\rangle + \frac{1}{2}\hbar^2|--\rangle = 2\hbar^2|--\rangle, \tag{3.619}$$

[33] Ово важи јер су s_1^2 и s_2^2 јединични оператори

на основу чега закључујемо да је репрезентација оператора $\boldsymbol{S}^2$ у базису $\{|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle\}$

$$\boldsymbol{S}^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}. \tag{3.620}$$

Видимо да матрица може да се подели у три подматрице. Две су 1Д⇒ вектори $|++\rangle$ и $|--\rangle$ су својствени за својствену вредност $2\hbar^2$.

Потребно је дијагонализовати 2Д подматрицу у базису $|+-\rangle$ и $|-+\rangle$ решавањем својствене једначине

$$0 = \det | \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} - \lambda I|. \tag{3.621}$$

Својствене вредности су $2\hbar^2$ и 0, док су својствени вектори

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \text{ за св. вредност } 2\hbar^2, \tag{3.622}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \text{ за св. вредност } 0. \tag{3.623}$$

Како су својствене вредности $\boldsymbol{S}^2$ једнаке $2\hbar^2$ и 0 закључујемо да су квантни бројеви $S = 1$ и $S = 0$.

Нови својствени базис изражен преко старог је

$$\begin{aligned} |0,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle), \\ |1,1\rangle &= |++\rangle, \\ |1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle), \\ |1,-1\rangle &= |--\rangle. \end{aligned} \tag{3.624}$$

2. Димензија тензорског производа потпростора је једнака

$$\dim (V^{(k_1\lambda_1)} \otimes V^{(k_2\lambda_2)}) = \dim V^{(k_1\lambda_1)} \dim V^{(k_2\lambda_2)} = (2k_1+1)(2k_2+1), \tag{3.625}$$

док је димензија збира потпростора

$$\dim \oplus_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} V^{(k\lambda_1\lambda_2)} = \sum_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} (2k+1). \tag{3.626}$$

Ако претпоставимо да је $k_1 > k_2$ и уведемо смену $k = k_1 - k_2 + i$ једначина (3.626) нам се трансформише у

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{2k_2} \big(2(k_1-k_2) + 2i + 1\big) &= 2(k_1-k_2)\sum_{i=0}^{2k_2} 1 + 2\sum_{i=0}^{2k_2} i + \sum_{i=0}^{2k_2} 1 \\ &= 2(k_1-k_2)(2k_2+1) + 2\frac{2k_2(2k_2+1)}{2} + (2k_2+1) \\ &= (2k_2+1)(2k_1 - 2k_2 + 2k_2 + 1) \\ &= (2k_2+1)(2k_1+1) \end{aligned} \tag{3.627}$$

На основу једначина (3.625) и (3.627) закључујемо да важи једнакост димензија.

3. Како важи ${\boldsymbol s_1}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 I$ и ${\boldsymbol s_2}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 I$, као и $\boldsymbol s_1 = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol\sigma_1$, $\boldsymbol s_2 = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol\sigma_2$, израз $\boldsymbol S^2 = (\boldsymbol s_1 + \boldsymbol s_2)^2$ се лако трансформише у тражени облик,

$$\begin{aligned} \boldsymbol S^2 &= {\boldsymbol s_1}^2 + {\boldsymbol s_2}^2 + 2\boldsymbol s_1 \cdot \boldsymbol s_2 \\ &= \frac{3}{4}\hbar^2 I + \frac{3}{4}\hbar^2 I + 2\frac{\hbar}{2}\boldsymbol\sigma_1 \cdot \frac{\hbar}{2}\boldsymbol\sigma_2 \\ &= \frac{1}{2}\hbar^2(3I + \boldsymbol\sigma_1 \cdot \boldsymbol\sigma_2). \end{aligned} \tag{3.628}$$

Спектрална форма оператора $\boldsymbol S^2$ и разлагања јединице нам дају

$$\boldsymbol S^2 = 2\hbar^2 P^{(3)} + 0P^{(1)},$$

$$I = P^{(3)} + P^{(1)}, \tag{3.629}$$

на основу чега добијамо тражене изразе за $P^{(3)}$ и $P^{(1)}$.

4. $V_1^{(\frac{1}{2})} \otimes V_2^{(\frac{1}{2})} = V_{12}^{(0)} \otimes V_{12}^{(1)}$, тј. слагањем два спина $s = \frac{1}{2}$ добијамо спинове 0 или 1.

ПОТПРОСТОР $V_{12}^{(1)}$

Једини некорелисани вектор који поседује магнетни квантни број 1 је $|++\rangle$ тако да закључујемо да важи $|1,1\rangle = |++\rangle$.

Оператором спуштања S^- у том потпростору можемо добити и вектор $|1,0\rangle$: $S^-|1,1\rangle = \hbar\sqrt{2}|1,0\rangle$. Како знамо да важи $|11\rangle = |++\rangle$ и $S^- = s_1^- + s_2^-$,

$$S^-|++\rangle = (s_1^- + s_2^-)|++\rangle = \hbar(|+-\rangle + |-+\rangle),$$

тако да је

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle). \tag{3.630}$$

Слично, $S^-|1,0\rangle = \hbar\sqrt{2}|1,-1\rangle$, па је

$$\begin{aligned} |1,-1\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}S^-|1,0\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}(s_1^- + s_2^-)\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \\ &= \frac{1}{2\hbar}(\hbar|--\rangle + \hbar|--\rangle) \\ &= |--\rangle. \end{aligned} \tag{3.631}$$

ПОТПРОСТОР $V_{12}^{(0)}$

Вектор $|0,0\rangle$ мора бити ортогоналан на сва три вектора $|1,M\rangle$.

Како је ортогоналан на $|1,1\rangle = |++\rangle$ и на $|1,-1\rangle = |--\rangle$, он мора бити линеарна комбинација вектора $|+-\rangle$ и $|-+\rangle$: $|0,0\rangle = \alpha|+-\rangle + \beta|-+\rangle$.

Из услова нормирања добијамо

$$\langle 0,0|0,0\rangle = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \tag{3.632}$$

а из ортогоналности са вектором $|1,0\rangle$ имамо

$$\langle 0,0|1,0\rangle = 0 \Rightarrow \alpha + \beta = 0. \tag{3.633}$$

Претпоставићемо да су оба броја, α и β, реална, тако да добијамо

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle). \tag{3.634}$$

5. Формула за разлагање тензорског производа потпростора на директан збир потпростора је

$$V_1^{(j_1)} \otimes V_2^{(j_2)} = V_{12}^{(j_1+j_2)} \otimes ... \otimes V_{12}^{(|j_1-j_2|)}. \tag{3.635}$$

ПОТПРОСТОР $V_{12}^{(j_1+j_2)}$

Једини некорелисани вектор који има максималну пројекцију $M = j_1 + j_2$ је $|j_1, j_2; m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle \Rightarrow$

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_2; j_1, j_2\rangle. \tag{3.636}$$

Из $J^-|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = \hbar\sqrt{2(j_1 + j_2)}|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \Rightarrow$

$$\begin{aligned}
&|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \\
&= \frac{1}{\hbar\sqrt{2(j_1 + j_2)}} J^-|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar\sqrt{2(j_1 + j_2)}} (J_1^- + J_2^-)|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar\sqrt{2(j_1 + j_2)}} [\hbar\sqrt{2j_1}|j_1, j_2; j_1 - 1, j_2\rangle] + \hbar\sqrt{2j_2}|j_1, j_2; j_1, j_2 - 1\rangle] \\
&= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}|j_1, j_2; j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}|j_1, j_2; j_1, j_2 - 1\rangle.
\end{aligned} \tag{3.637}$$

Остале векторе стандардног базиса који припадају датом потпростору добијамо даљим деловањем оператора анихилације J^-.

ПОТПРОСТОР $V_{12}^{(j_1+j_2-1)}$

У овом потпростору максимална вредност магнетног квантног броја M је $j_1 + j_2 - 1$. Корелисани вектор са највећом вредношћу M $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle$ линеарна комбинација два некорелисана вектора

$$|j_1 + j_2 - 1; j_1 + j_2 - 1\rangle = \alpha|j_1, j_2; j_1 - 1, j_2\rangle + \beta|j_1, j_2; j_1, j_2 - 1\rangle. \tag{3.638}$$

Из услова нормализације добијамо

$$\langle j_1+j_2-1, j_1+j_2-1|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle = 1 \Rightarrow |\alpha|^2+|\beta|^2 = 1, \quad (3.639)$$

док нам ортогоналност са $|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle$ даје

$$\langle j_1+j_2-1, j_1+j_2-1|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle = 0 \Rightarrow \alpha\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}+\beta\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} = 0. \quad (3.640)$$

Ако изаберемо реалне коефицијенте α и β добијамо

$$|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}|j_1, j_2; j_1, j_2-1\rangle - \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}|j_1, j_2; j_1-1, j_2\rangle. \quad (3.641)$$

Ово је први вектор из потростора $V^{(j_1+j_2-1)}$ и дејством оператора J^- добићемо све векторе стандардног базиса из овог потпростора.

Потом се прелази на потпростор $V^{(j_1+j_2-2)}$ и тако даље док се не исцрпе сви потростори.

6. Користећи исту процедуру као и у претходним задацима добијају се својствени вектори

$$|2,2\rangle = |1,1;1,1\rangle,$$

$$|2,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1;1,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1;0,1\rangle,$$

$$|2,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|1,1;1,-1\rangle + \frac{2}{\sqrt{6}}|1,1;0,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|1,1;-1,1\rangle,$$

$$|2,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1;0,-1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1;-1,0\rangle,$$

$$|2,-2\rangle = |1,1;-1,-1\rangle,$$

$$|1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1;1,0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1;0,1\rangle,$$

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1;1,-1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1;-1,1\rangle,$$

$$|1,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1;0,-1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1;-1,0\rangle,$$

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|1,1;1,-1\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}|1,1;0,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|1,1;-1,1\rangle. \quad (3.642)$$

КОМЕНТАР:

Ако разматрамо физички проблем у коме је двочестични систем у p^2 конфигурацији, таласна функција која одговара том стању у некорелисаном базису је [34]

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \langle \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2 | r_1, r_2; 1, 1; m_1, m_2\rangle = R_1(r_1)R_2(r_2)Y_1^{m_1}(\theta_1, \varphi_1)Y_1^{m_2}(\theta_2, \varphi_2), \tag{3.643}$$

где су $\boldsymbol{r}_1(r_1, \theta_1, \varphi_1)$ и $\boldsymbol{r}_2(r_2, \theta_2, \varphi_2)$ координате честица. Уколико желимо да пређемо у корелисани базис простора стања $V_{\theta_1,\varphi_1} \otimes V_{\theta_2,\varphi_2}$ тада је, нпр.

$\langle \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2 | r_1, r_2; 0, 0\rangle =$

$R_1(r_1)R_2(r_2)\frac{1}{\sqrt{3}}[Y_1^1(\theta_1, \varphi_1)Y_1^{-1}(\theta_2, \varphi_2) - Y_1^0(\theta_1, \varphi_1)Y_1^0(\theta_2, \varphi_2) + Y_1^{-1}(\theta_1, \varphi_1)Y_1^1(\theta_2, \varphi_2)]$.

7. У ово задатку се први пут срећемо са слагањем три угаона момента. Како знамо да је

$$V^{(1/2)} \otimes V^{(1/2)} = V^{(1)} \oplus V^{(0)}, \tag{3.644}$$

можемо да покажемо да се тензорски производ три дводимензионална простора разлазе на један четвородимензионалан и два једнодимензионална простора,

$$\begin{aligned} V_1^{(1/2)} \otimes V_2^{(1/2)} \otimes V_3^{(1/2)} &= (V_{12}^{(1)} \oplus V_3^{(0)}) \otimes V_3^{(1/2)} \\ &= (V_{12}^{(1)} \otimes V_3^{(1/2)}) \oplus (V_{12}^{(0)} \otimes V_3^{(1/2)}) \\ &= V_{123}^{(3/2)} \oplus V_{123}^{1(1/2)} \oplus V_{123}^{2(1/2)}. \end{aligned} \tag{3.645}$$

Векторе који се добијају из тензорског производа $(V_{12}^{(0)} \otimes V_3^{(1/2)}) = V_{123}^{2(1/2)}$ је најлакше одредити. Потпростор $V^{(0)}$ је једнодимензионалан, њему одговара само вектор

$$|0, 0\rangle = (| + -\rangle - | - +\rangle)/\sqrt{2}, \tag{3.646}$$

док потпростору $V^{(1/2)}$ одговарају два базисна вектора, $|\pm\rangle$. Вектор највеће тежине је

$$|1/2, 1/2\rangle_2 = |0, 0\rangle|+\rangle = (| + -+\rangle - | - ++\rangle)/\sqrt{2}, \tag{3.647}$$

док је вектор најмање тежине

$$|1/2, -1/2\rangle_2 = |0, 0\rangle|-\rangle = (| + --\rangle - | - +-\rangle)/\sqrt{2}. \tag{3.648}$$

Сада прелазимо на потпростор $V_{123}^{(3/2)}$ добијеног из тензорског производа $(V_{12}^{(1)} \otimes V_3^{(1/2)})$. Вектор највеће тежине, $|3/2, 3/2\rangle$, је једнак

$$|3/2, 3/2\rangle = | + ++\rangle. \tag{3.649}$$

Користећи оператор спуштања, $J_- = S_{1-} + S_{2-} + S_{3-}$,

$$\begin{aligned} J_-|3/2, 3/2\rangle &= \hbar\sqrt{3}|3/2, 1/2\rangle, \\ J_-|3/2, 3/2\rangle &= (S_{1-} + S_{2-} + S_{3-})| + ++\rangle = \hbar(| - ++\rangle + | + -+\rangle + | + +-\rangle), \end{aligned}$$

[34] Простор стања је $V_{\boldsymbol{r}_1} \otimes V_{\boldsymbol{r}_2} = V_{r_1} \otimes V_{r_2} \otimes V_{\theta_1,\varphi_1} \otimes V_{\theta_2,\varphi_2}$. Мисли се на некорелисани базис у $V_{\theta_1,\varphi_1} \otimes V_{\theta_2,\varphi_2}$

добијамо

$$|3/2,1/2\rangle = (|-++\rangle + |+-+\rangle + |++-\rangle)/\sqrt{3}. \tag{3.650}$$

Користећи исту процедуру, налазимо остале векторе из потпростора 3/2

$$\begin{aligned} |3/2,-1/2\rangle &= (|--+\rangle + |+--\rangle + |-+-\rangle)/\sqrt{3}, \\ |3/2,-3/2\rangle &= |---\rangle. \end{aligned} \tag{3.651}$$

Вектори из потпростора $V_{123}^{1(1/2)}$,

$$|1/2,1/2\rangle_1 = \alpha_1|++-\rangle + \beta_1|+-+\rangle + \gamma_1|-++\rangle, \tag{3.652}$$
$$|1/2,-1/2\rangle_1 = \alpha_2|+--\rangle + \beta_2|-+-\rangle + \gamma_2|--+\rangle, \tag{3.653}$$

се добијају из услова ортонормираности

$$\begin{aligned} 0 &= {}_2\langle 1/2,1/2|1/2,1/2\rangle_1 = \langle 3/2,1/2|1/2,1/2\rangle_1, \\ 0 &= {}_2\langle 1/2,-1/2|1/2,-1/2\rangle_1 = \langle 3/2,-1/2|1/2,-1/2\rangle_1, \\ 1 &= \alpha_1^2+\beta_1^2+\gamma_1^2, \\ 1 &= \alpha_2^2+\beta_2^2+\gamma_2^2. \end{aligned} \tag{3.654}$$

Решавањем система једначина 3.654 налазимо да је

$$|1/2,1/2\rangle_1 = (2|++-\rangle - |+-+\rangle - |-++\rangle)/\sqrt{6}, \tag{3.655}$$
$$|1/2,-1/2\rangle_1 = (-|+--\rangle - |-+-\rangle + 2|--+\rangle)/\sqrt{6}. \tag{3.656}$$

8. Код атома водоника слажемо два угаона момента, орбитални угаони момент l и спински угаони момент $\frac{1}{2}$.

$$V^{(\ell)} \otimes V^{(\frac{1}{2})} = V^{(\ell+\frac{1}{2})} \otimes V^{(\ell-\frac{1}{2})} \tag{3.657}$$

ПОТПРОСТОР $V^{(j=\ell+\frac{1}{2})}$

Вектор максималне тежине је $|\ell+\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}\rangle = |\ell,\frac{1}{2};\ell,+\rangle$.

$$J^-|\ell+\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}\rangle = \hbar\sqrt{2\ell+1}|\ell+\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\rangle \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} |\ell+\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2\ell+1}}J^-|\ell+\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2\ell+1}}(L^-+S^-)|\ell,\frac{1}{2};\ell,+\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2\ell+1}}[\hbar\sqrt{2\ell}|\ell,\frac{1}{2};\ell-1,+\rangle + \hbar|\ell,\frac{1}{2};\ell,-\rangle] \\ &= \sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}}|\ell,\frac{1}{2};\ell-1,+\rangle + \sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}|\ell,\frac{1}{2};\ell,-\rangle \end{aligned} \tag{3.658}$$

Ако применимо J^- још једном добијамо:

$$|\ell+\frac{1}{2},\ell-\frac{3}{2}\rangle=\sqrt{\frac{2\ell-1}{2\ell+1}}|\ell,\frac{1}{2};\ell-2,+\rangle+\sqrt{\frac{2}{2\ell+1}}|\ell,\frac{1}{2};\ell-1,-\rangle \qquad (3.659)$$

Генерално, вектор $|\ell+\frac{1}{2},M\rangle$ је линеарна комбинација два некорелисана вектора $|\ell,\frac{1}{2};M-\frac{1}{2},+\rangle$ и $|\ell,\frac{1}{2};M+\frac{1}{2},-\rangle$

Испоставља се да важи

$$|\ell+\frac{1}{2},M\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}[\sqrt{\ell+M+\frac{1}{2}}|\ell,\frac{1}{2};M-\frac{1}{2},+\rangle+\sqrt{\ell-M+\frac{1}{2}}|\ell,\frac{1}{2};M+\frac{1}{2},-\rangle] \qquad (3.660)$$

Можемо рекурентно показати да је ово тачно

$$J^-|\ell+\frac{1}{2},M\rangle=\hbar\sqrt{(\ell+M+\frac{1}{2})(\ell-M+\frac{3}{2})}|\ell+\frac{1}{2},M-1\rangle\Rightarrow$$

$$|\ell+\frac{1}{2},M-1\rangle=\frac{1}{\hbar\sqrt{(\ell+M+\frac{1}{2})(\ell-M+\frac{3}{2})}}J^-|\ell+\frac{1}{2},M\rangle=$$

$$=[\sqrt{\frac{\ell+M+\frac{1}{2}}{\ell+M+\frac{1}{2}}}\sqrt{\frac{\ell+M+\frac{3}{2}}{\ell+M+\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{\ell+M-\frac{1}{2}}{2\ell+1}}|\ell,\frac{1}{2};M-\frac{3}{2},+\rangle$$

$$+\sqrt{\frac{\ell+M+\frac{1}{2}}{\ell+M+\frac{1}{2}}}\sqrt{\frac{1}{\ell+M+\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}|\ell,\frac{1}{2};M-\frac{1}{2},-\rangle$$

$$+\sqrt{\frac{\ell+M+\frac{1}{2}}{\ell+M+\frac{1}{2}}}\sqrt{\frac{\ell+M+\frac{1}{2}}{\ell+M+\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{\ell+M+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}|\ell,\frac{1}{2};M-\frac{1}{2},-\rangle]$$

$$|\ell+\frac{1}{2},M\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}[\sqrt{\ell+M-\frac{1}{2}}|\ell,\frac{1}{2};M-\frac{3}{2},+\rangle+\sqrt{\ell-M+\frac{3}{2}}|\ell,\frac{1}{2};M-\frac{1}{2},-\rangle] \qquad (3.661)$$

Добијамо исти израз, само што уместо M имамо $M-1$, тако да потврђујемо претпостављену рекурентну релацију.

ПОТПРОСТОР $V^{(J=\ell-\frac{1}{2})}$

Вектор максималне тежине у овом потпростору $|\ell-\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\rangle$ је линеарна комбинација два некорелисана вектора $|\ell,\frac{1}{2};\ell,-\rangle$ и $|\ell,\frac{1}{2};\ell-\frac{1}{2},+\rangle$

$$|\ell-\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\rangle=\alpha|\ell,\frac{1}{2};\ell,-\rangle+\beta|\ell,\frac{1}{2};\ell-\frac{1}{2},+\rangle \qquad (3.662)$$

Услов нормираности таласне функције и ортогоналности на $|\ell+\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\rangle$ нам дају

$$\langle\ell-\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}|\ell-\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\rangle=1\Rightarrow|\alpha|^2+|\beta|^2=1$$

$$\langle \ell+\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}|\ell-\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\rangle = 1 \Rightarrow \alpha\sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}+\beta\sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}} = 0 \tag{3.663}$$

Изабраћемо да су α и β реални бројеви и добијамо:

$$|\ell-\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}[\sqrt{2\ell}|\ell,\frac{1}{2};\ell,-\rangle - |\ell,\frac{1}{2};M-\frac{1}{2},+\rangle] \tag{3.664}$$

Могли смо одмах да нађемо вектор $|\ell-\frac{1}{2},M\rangle$ за произвољну вредност M. Он је линеарна комбинација два некорелисана вектора $|\ell,\frac{1}{2};M+\frac{1}{2},-\rangle$ и $|\ell,\frac{1}{2};M-\frac{1}{2},+\rangle$ и из услова нормираности и ортогоналности на $|\ell+\frac{1}{2},M\rangle$ добијамо

$$|\ell-\frac{1}{2},M\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}[\sqrt{\ell+M+\frac{1}{2}}|\ell,\frac{1}{2};M+\frac{1}{2},-\rangle - \sqrt{\ell+M+\frac{1}{2}}|\ell,\frac{1}{2};M-\frac{1}{2},+\rangle] \tag{3.665}$$

Стања $|\ell,\frac{1}{2};m,\pm\rangle$ честице спина $\frac{1}{2}$ могу да се прикажу двокомпонентним спинорима

$$Y_\ell^m\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \text{ за пројекцију спина } +1/2 \tag{3.666}$$

и

$$Y_\ell^m\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \text{ за пројекцију спина -1/2} \tag{3.667}$$

Тако да укупна таласна функција изражена у стандардном базису угаоног дела и радијалног дела изгледа као:

$$\Psi_{\ell+\frac{1}{2},M}(\boldsymbol{r},s) = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}R_{n,\ell}(r)\begin{pmatrix}\sqrt{\ell+M+\frac{1}{2}}Y_\ell^{M-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\\ \sqrt{\ell-M+\frac{1}{2}}Y_\ell^{M+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\end{pmatrix} \tag{3.668}$$

$$\Psi_{\ell-\frac{1}{2},M}(\boldsymbol{r},s) = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}R_{n,\ell}(r)\begin{pmatrix}-\sqrt{\ell-M+\frac{1}{2}}Y_\ell^{M-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\\ \sqrt{\ell+M+\frac{1}{2}}Y_\ell^{M+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\end{pmatrix} \tag{3.669}$$

9. Инфинитезимална се дефинише као ротација која је бесконачно блиска идентичној ротацији, а то је ротација $\mathbb{R}_{\boldsymbol{u}}(d\alpha)$ за бесконачно мали угао $d\alpha$ око произвољне осе $\boldsymbol{u}$.

   Трансформација вектора $\boldsymbol{O}M$ под инфинитезималним ротацијама $\mathbb{R}_{\boldsymbol{u}}(d\alpha)$ може се написати, до првог реда по $d\alpha$, као

$$\mathbb{R}_{\boldsymbol{u}}(d\alpha)\boldsymbol{O}M = \boldsymbol{O}M + d\alpha\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{O}M \tag{3.670}$$

   Ако говоримо о операторима ротације у простору стања система, они имају форму

$$R_{\boldsymbol{u}}(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}} \tag{3.671}$$

   , где је $\boldsymbol{J}$ оператор укупног угаоног момента система.

РОТАЦИЈА ОПСЕРВАБЛИ

Разматрамо опсерваблу A, која нас повезује са датим физичком системом; претпоставићемо, да би упростили нотацију, да је спектар A дискретан и недегенерисан

$$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle \tag{3.672}$$

Да би разумели како се опсервабла понаша под ротацијама, замислимо да имамо мерни апарат који може да мери A физичког система под разматрањем. Сада, опесервабла A', која је трансформација опсервабле A у односу на геометријске ротације $\mathbb{R}$, је по дефиницији оно што се мери мерним апаратом када делује ротација $\mathbb{R}$.

Нека се систем налази у стању $|u_n\rangle$, које је својствено за оператор A. Мерни апарат који мери A у овом систему даће нам вредност a_n. Али, пре него што извршимо мерење, направимо симултану ротацију $\mathbb{R}$ и физичког система и мерног апарата тако да је релативна позиција непромењена. Ако опсервабла A који разматрамо описује физичку величину повезану само са системом који смо ротирали (тј. независно од осталих система или апарата које нисмо ротирали), онда ће у новој позицији мерни апарат опет давати исти резултат a_n.

После ротације, апарат, по дефиницији, мери A', и систем се налази у стању

$$|u_n'\rangle = R|u_n\rangle \tag{3.673}$$

Како важе релације

$$\begin{aligned} A|u_n\rangle &= a_n|u_n\rangle && (3.674)\\ A'|u_n'\rangle &= a_n|u_n'\rangle && (3.675) \end{aligned}$$

Ако релацију (3.673) заменимо у претходну једначину, и упоредимо последње две једначине добијамо

$$R^\dagger A' R|u_n\rangle = A|u_n\rangle \tag{3.676}$$

Како скуп вектора $|u_n\rangle$ гради базис у простору стања долазимо до релације

$$A' = RAR^\dagger \tag{3.677}$$

У специјалном случају инфинитезималних ротација $R_{\boldsymbol{u}}(d\alpha)$ добијамо

$$A' = (1 - \frac{i}{\hbar}d\alpha \boldsymbol{J}\boldsymbol{u})A(1 + \frac{i}{\hbar}d\alpha \boldsymbol{J}\boldsymbol{u}) \tag{3.678}$$

Сређивањем претходне једначине долазимо до израза

$$A' = A - \frac{i}{\hbar}d\alpha[\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}, A] \tag{3.679}$$

СКАЛАРНА ОПСЕРВАБЛА

Да би нека опсервабла била скалар мора важити

$$A' = A \tag{3.680}$$

за све ротације R у простору стања. Једначина (3.679) нам каже да за скаларну опсерваблу важи

$$[A, \boldsymbol{J}] = 0 \tag{3.681}$$

тј. *скаларна опсервабла A комутира са све три компоненте укупнох угаоног момента $\boldsymbol{J}$.*

ВЕКТОРСКЕ ОПСЕРВАБЛЕ

Векторска опсервабла $\boldsymbol{V}$ је скуп три опсервабле V_x, V_y, V_z које су у односу на ротације трансформишу по карактеристичном закону за векторе.

Разматрајмо, нпр. компоненту V_x ове опсервабле. Испитаћемо њено понашање под инфинитезималним ротацијама око сваке од координатних оса. V_x се очигледно не мења под ротацијама око O_x, па релација (3.679) може да се напише у облику

$$V_x = V_x - \frac{i}{\hbar}[J_x, V_x] \tag{3.682}$$

на основу које добијамо комутациону релацију

$$[J_x, V_x] = 0 \tag{3.683}$$

Ако извршимо ротацију $\mathbb{R}_{\boldsymbol{e}_y}(d\alpha)$ око O_y осе прелазак из V_x у V_x' је

$$V_x' = V_x - \frac{i}{\hbar} d\alpha [J_y, V_x] \tag{3.684}$$

Знамо да је V_x компонента $\boldsymbol{V}$ дуж O_x осе, за јединични вектор e_x. Ротација $\mathbb{R}_{\boldsymbol{e}_y}(d\alpha)$ слика $\boldsymbol{e}_x$ у $\boldsymbol{e}'_x$ у складу са једначином (3.670)

$$\boldsymbol{e}'_x = \boldsymbol{e}_x + d\alpha \boldsymbol{e}_y \times \boldsymbol{e}_x = \boldsymbol{e}_x - d\alpha \boldsymbol{e}_z \tag{3.685}$$

Ако је $\boldsymbol{V}$ векторска опсервабла, V_x' мора бити исто као и $\boldsymbol{V}\boldsymbol{e}'_x$

$$V_x' = \boldsymbol{V}\boldsymbol{e}_x - d\alpha \boldsymbol{V}\boldsymbol{e}_z = V_x - d\alpha V_z \tag{3.686}$$

Упоређујући једначине (3.684) и (3.686) добијамо

$$[V_x, J_y] = i\hbar V_z \tag{3.687}$$

За инфинитезималне ротације $\mathbb{R}_{\boldsymbol{e}_z}(d\alpha)$ око O_z осе, на сличан начин као малопре долазимо до релације

$$[J_z, V_x] = i\hbar V_y \tag{3.688}$$

Испитивањем понашања опсервабли V_y и V_z под ротацијама, покаћемо формуле које се могу извести из једначина (3.684), (3.686) и (3.688) цикличним пермутацијама индекса x, y и z.

10. Предвиђен за самосталан рад.

11. Уводимо операторе V_+, V_-, J_- и J_+ који су дефинисани као

$$\begin{aligned} V_\pm &= V_x \pm iV_y \\ J_\pm &= J_x \pm iJ_y \end{aligned} \tag{3.689}$$

Користећи дефиницију векторског оператора, добијамо комутационе релације

$$[J_x, V_\pm] = \mp\hbar J_z$$

$$[J_y, V_\pm] = -i\hbar V_z$$

$$[J_z, V_\pm] = \pm\hbar V_\pm \tag{3.690}$$

На основу ових релација се налазе комутационе релације између J_+, J_-, V_+ и V_-

$$[J_+, V_+] = 0$$

$$[J_+, V_-] = 2\hbar J_z$$

$$[J_-, V_+] = -2\hbar J_z$$

$$[J_-, V_-] = 0 \tag{3.691}$$

НЕНУЛТИ МАТРИЧНИ ЕЛЕМЕНТИ $\boldsymbol{V}$ У СТАНДАРДНОМ БАЗИСУ

Прва ствар која нас занима је када су матрични елементи

$$\langle j, m, \lambda | V_z | j', m', \lambda' \rangle \tag{3.692}$$

ненулти. Како је $[V_z, J_z] = 0$ добијамо

$$\langle j, m, \lambda | J_z V_z | j', m', \lambda' \rangle = \langle j, m, \lambda | V_z J_z | j', m', \lambda' \rangle \tag{3.693}$$

Како су вектори $|j, m, \lambda\rangle$ својсвени вектори оператора J_z

$$J_z |j, m, \lambda\rangle = m\hbar |j, m\lambda\rangle$$

$$\langle j, m, \lambda | J_z = \langle j, m, \lambda | m\hbar \tag{3.694}$$

добијамо

$$m\hbar \langle j, m, \lambda | V_z | j', m', \lambda' \rangle = m'\hbar \langle j, m, \lambda | V_z | j', m', \lambda' \rangle \tag{3.695}$$

на основу чега закључујемо да су матрични елементи ненулти за $m = m'$

Сада нас занимају матрични елементи $\langle j, m, \lambda | V_\pm | j', m', \lambda' \rangle$. Како је

$$J_z V_\pm = V_\pm J_z \pm \hbar V_\pm \tag{3.696}$$

, деловањем сваке стране овог израза на кет $|j', m', \lambda'\rangle$ добијамо

$$\begin{aligned} J_z(V_\pm |j', m', \lambda'\rangle) &= V_\pm J_z |j', m', \lambda'\rangle \pm \hbar V_\pm |j', m', \lambda'\rangle \\ &= (m' \pm 1)\hbar V_\pm |j', m', \lambda'\rangle \end{aligned} \tag{3.697}$$

Последња једначина нам каже да је $V_\pm|j',m',\lambda'\rangle$ својствени вектор оператора J_z за својствену вредност $(m\pm 1)\hbar$ [35]

$\Longrightarrow$ скаларни производ $\langle j,m,\lambda|V_\pm|j',m',\lambda'\rangle$ је различит од нуле за $m-m'=\pm 1$. Добили смо СЕЛЕКЦИОНА ПРАВИЛА

$$V_z \Longrightarrow \Delta m = m - m' = 0 \tag{3.698}$$

$$V_+ \Longrightarrow \Delta m = m - m' = 1 \tag{3.699}$$

$$V_- \Longrightarrow \Delta m = m - m' = -1 \tag{3.700}$$

ПРОПОРЦИОНАЛНОСТ МАТРИЧНИХ ЕЛЕМЕНАТА J и V УНУТАР ПОТПРОСТОРА В$^{(j,\lambda)}$

Како је $[J_+,V_+]=0$ добијамо

$$\langle j,m+2,\lambda|J_+V_+|j,m,\lambda\rangle = \langle j,m+2,\lambda|V_+J_+|j,m,\lambda\rangle \tag{3.701}$$

Ако на обе страна последње једначине уврстимо, између оператора J_+ и V_+, идентичан оператор I у форми

$$I = \sum_{j',m',\lambda'} |j',m',\lambda'\rangle\langle j',m',\lambda'| \tag{3.702}$$

добићемо

$$\begin{aligned} &\sum_{j',m',\lambda'} \langle j,m+2,\lambda|J_+|j',m',\lambda'\rangle\langle j',m',\lambda'|V_+|j,m,\lambda\rangle \\ &= \sum_{j',m',\lambda'} \langle j,m+2,\lambda|V_+|j',m',\lambda'\rangle\langle j',m',\lambda'|J_+|j,m,\lambda\rangle \end{aligned} \tag{3.703}$$

Знајући ненулте матричне елементе оператора J_+ и V_+ можемо закључити да сума у претходном изразу нестаје јер се једини ненулти матрични елементи добијају за $\lambda'=\lambda$ и $m'=m+1$, тако да добијамо

$$\begin{aligned} &\langle j,m+2,\lambda|J_+|j,m+1,\lambda\rangle\langle j,m+1,\lambda|V_+|j,m,\lambda\rangle \\ &= \langle j,m+2,\lambda|V_+|j,m+1,\lambda\rangle\langle j,m+1,\lambda|J_+|j,m,\lambda\rangle \end{aligned} \tag{3.704}$$

Претходна једнакост се може написати и у погоднијој форми

$$\frac{\langle j,m+1,\lambda|V_+|j,m,\lambda\rangle}{\langle j,m+1,\lambda|J_+|j,m,\lambda\rangle} = \frac{\langle j,m+2,\lambda|V_+|j,m+1,\lambda\rangle}{\langle j,m+2,\lambda|J_+|j,m+1,\lambda\rangle} \tag{3.705}$$

[35] На основу једначине (3.697) не можемо закључити да је вектор $V_\pm|j',m',\lambda'\rangle$ пропорционалан вектору $|j',m'\pm 1,\lambda'\rangle$. Највише што можемо рећи је да важи релација

$$V_\pm|j',m',\lambda'\rangle = \sum_{\lambda,j} C_{\lambda,j}|j,m'\pm 1,\lambda\rangle$$

Последња релација важи докле год бра и кет вектори у датој релацији постоје, тј. за $j-2 \geq m \geq -j$.

$$\frac{\langle j,-j+1,\lambda|V_+|j,-j,\lambda\rangle}{\langle j,-j+1,\lambda|V_+|j,-j,\lambda\rangle} = \cdots = \frac{\langle j,j,\lambda|V_+|j,j-1,\lambda\rangle}{\langle j,j,\lambda|J_+|j,j-1,\lambda\rangle} \tag{3.706}$$

Овај однос је једнак $\alpha_+(j,\lambda)$ па, коначно, можемо написати

$$\langle j,m+1,\lambda|V_+|j,m,\lambda\rangle = \alpha_+(j,\lambda)\langle j,m+1,\lambda|J_+|j,m,\lambda\rangle \tag{3.707}$$

Коефицијент α_+ зависи од j и λ, али не и од m.

Селекционо правило за V_+ нам говори да су матрични елементи $\langle j,m',\lambda|V_+|j,m,\lambda\rangle$ и $\langle j,m',\lambda|J_+|j,m,\lambda\rangle$ ненулти за $\Delta m = m'-m = 1$, тако да за свако m и m' можемо написати

$$\langle j,m',\lambda|V_+|j,m,\lambda\rangle = \alpha_+(j,\lambda)\langle j,m',\lambda|J_+|j,m,\lambda\rangle \tag{3.708}$$

Овај резултат изражава чињеницу да су сви матрични елементи оператора V_+ унутар потпростора $V^{(j,\lambda)}$ пропорционални матричним елементима оператора J_+.

Како је $[J_-,V_-]=0$, на готово идентичан начин као и за операторе V_+ и J_+ можемо доћи до релације

$$\langle j,m',\lambda|V_-|j,m,\lambda\rangle = \alpha_-(j,\lambda)\langle j,m',\lambda|J_-|j,m,\lambda\rangle \tag{3.709}$$

која нам говори да су, унутар потпростора $V^{(j,\lambda)}$, матрични елементи оператора V_-, пропорционални матричим елементима J_-.

На основу комутационе релације $[J_-,V_+] = -2\hbar V_z$ и чињенице да су матрични елементи оператора V_z ненулти за $\Delta m = 0$, можемо написати

$$-2\hbar\langle j,m,\lambda|V_z|j,m,\lambda\rangle = \langle j,m,\lambda|J_-V_+ - V_+J_-|j,m,\lambda\rangle \tag{3.710}$$

Знамо како J_- делује на векторе стандардног базиса, тако да једначину (3.710) можемо написати у облику

$$\begin{aligned} &-2\hbar\langle j,m,\lambda|V_z|j,m,\lambda\rangle \\ &\quad= \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\langle j,m+1,\lambda|V_+|j,m,\lambda\rangle \\ &\quad- \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\langle j,m,\lambda|V_+|j,m-1,\lambda\rangle \end{aligned} \tag{3.711}$$

Ако искористимо једначину (3.708), и напишемо

$$\begin{aligned} \langle j,m+1,\lambda|V_+|j,m,\lambda\rangle &= \alpha_+(j,\lambda)\langle j,m+1,\lambda|J_+|j,m,\lambda\rangle \\ &= \hbar\alpha_+(j,\alpha)\sqrt{j(j+1)-m(m+1)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle j,m+1,\lambda|V_+|j,m,\lambda\rangle &= \alpha_+(j,\alpha)\langle j,m,\lambda|J_+|j,m-1,\lambda\rangle \\ &= \hbar\alpha_+(j,\alpha)\sqrt{j(j+1)-(m-1)m} \end{aligned} \tag{3.712}$$

долазимо до релације

$$\langle j,m,\lambda|V_z|j,m,\lambda\rangle = \hbar\alpha_+(j,\lambda) \tag{3.713}$$

Слично, користећи комутациону релацију $[J_+, V_-] = 2\hbar V_z$ и чињеницу да су ненулти матрични елементи оператора V_z за $\Delta m = 0$ добијамо

$$\langle j,m,\lambda|V_z|j,m,\lambda\rangle = \hbar\alpha_-(j,\lambda) \tag{3.714}$$

На основу последње две једначине добијамо

$$\alpha_+(j,\lambda) = \alpha_-(j,\lambda) = \alpha(j,\lambda) \tag{3.715}$$

Тривијално се показује да важи једнакост

$$\langle j,m,\lambda|V_z|j,m',\lambda\rangle = \alpha(j,\lambda)\langle j,m,\lambda|J_z|j,m',\lambda\rangle \tag{3.716}$$

тако да су, унутар потпростора $V^{(j,\lambda)}$, матрични елементи оператора V_z, пропорционални матричим елементима J_z.

Како је векторски оператор $\boldsymbol{V}$ линеарна комбинација вектора $V_\pm$ и V_z, на основу једначина (3.707), (3.709) и (3.716) долазимо до коначног резултата

$$\langle j,m,\lambda|\boldsymbol{V}|j,m',\lambda\rangle = \alpha(j,\lambda)\langle j,m,\lambda|\boldsymbol{J}|j,m',\lambda\rangle \tag{3.717}$$

који представља *Вигнер-Екартов теорем за векторске операторе*, и каже да су, унутар потпростора $V^{(j,\lambda)}$, матрични елементи векторског оператора $\boldsymbol{V}$ пропорционални матричним елементима векторског оператора $\boldsymbol{J}$.

Ако са $P(j,\lambda)$ означимо пројектор на потпростор $V^{(j,\lambda)}$, Вигнер-Екартов теорем можемо да напишемо и у облику

$$P(j,\lambda)\boldsymbol{V}P(j,\lambda) = \alpha(j,\lambda)P(j,\lambda)\boldsymbol{J}P(j,\lambda) \tag{3.718}$$

12. Разматрајмо скаларни оператор $\boldsymbol{J}\boldsymbol{V}$; његов одсечак у потпростору $V^{(j,\lambda)}$ је једнак $P(j,\lambda)\boldsymbol{J}\boldsymbol{V}P(j,\lambda)$. Ако искористимо релацију

$$[\boldsymbol{J}, P(j,\lambda)] = 0 \tag{3.719}$$

,да је одсечак оператора $\boldsymbol{J}^2$ у потпростору $V^{(j,\lambda)}$ једнак $\hbar^2 j(j+1)$, и једначину (3.718) можемо да покажемо

$$\begin{aligned} P(j,\lambda)\boldsymbol{J}\boldsymbol{V}P(j,\lambda) &= \boldsymbol{J}\,\underbrace{P(j,\lambda)\boldsymbol{V}P(j,\lambda)}_{\text{Вигнер-Екарт}} = \alpha(j,\lambda)\boldsymbol{J}P(j,\lambda)\boldsymbol{J}P(j,\lambda) \\ &= \alpha(j,\lambda)P(j,\lambda)\boldsymbol{J}^2P(j,\lambda) = \alpha(j,\lambda)\hbar^2 j(j+1)P^2(j,\lambda) \\ &= \alpha(j,\lambda)\hbar^2 j(j+1)P(j,\lambda) \end{aligned} \tag{3.720}$$

да је одсечак оператора $vecJ\boldsymbol{V}$ у потпростору $V^{j,\lambda}$ једнак $\alpha(j,\lambda)\hbar^2 j(j+1)P(j,\lambda)$.

Ако је $|\psi_{j,\lambda}$ произвољно нормализовано стање у потпростору $V^{(j,\lambda)}$, средња вредност $\boldsymbol{JV}$ у овом стању је

$$\langle \boldsymbol{JV} \rangle_{j,\lambda} = \alpha(j,\lambda)\hbar^2 j(j+1) \tag{3.721}$$

Сада једначину (3.718) можемо да напишемо у облику

$$P(j,\lambda)\boldsymbol{V}P(j,\lambda) = \frac{\langle \boldsymbol{JV} \rangle_{j,\lambda}}{\hbar j(j+1)} P(j,\lambda)\boldsymbol{J}P(j,\lambda) \tag{3.722}$$

Овај резултат се назива *пројекциони теорем.* Оно што је корисно у пројекционом теорему је да сада имамо израз на основу кога можемо да израчунамо коефицијент $\alpha(j,\lambda)$. Наравно, ово решење важи уколико говоримо о потпростору $P(j,\lambda)$. Често се пројекциони теорем пише у облику

$$\boldsymbol{V} = \frac{\langle \boldsymbol{JV} \rangle_{j,\lambda}}{\hbar j(j+1)} \boldsymbol{J} \tag{3.723}$$

и у њему се имплицитно подразумева да ова формула важи САМО унутар потпростора $V^{(j,\lambda)}$.

13. Нека је $\boldsymbol{L}$ укупан орбитални угаони момент свих електрона атома $\boldsymbol{L} = \sum_i \boldsymbol{\ell}_i$, док је $\boldsymbol{S}$ укупан спински угаони момент свих атома $\boldsymbol{S} = \sum_i \boldsymbol{s}_i$.

Укупан угаони момент атома (под претпоставком да је спин нуклеуса једнак нули) је $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$. У одсуству магнетног поља, хамилтонијан атома H_0 комутира са $\boldsymbol{J}$.

Претпоставићемо да H_0, $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ и $\boldsymbol{J}_z$ формирају КСКО, и са $|E_0, L, S, J, M\rangle$ ћемо означити заједничке својствене векторе са својственим вредностима E_0, $\hbar^2\ell(\ell+1)$, $\hbar^2 s(s+1)$, $\hbar^2 j(j+1)$ и $M\hbar$. [36]

Како је

$$J_\pm |E_0, L, S, J, M\rangle = \hbar\sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)}|E_0, L, S, J, M\pm 1\rangle \tag{3.724}$$

својствени вектор оператора H_0 за својствену вредност E_0, видимо да је енергија E_0 $2J+1$ пута дегенерисана.

У присуству магнетног поља $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$, хамилтонијан постаје

$$H = H_0 + H_1 = H_0 - \boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{L} + \underbrace{g_0}_{\approx 2}\boldsymbol{S}) = H_0 - \frac{\mu_b}{\hbar}(L_z + 2S_z) \tag{3.725}$$

Ако магнетно поље није довољно велико, хамилтонијан H_1 можемо посматрати као пертурбацију. Матричне елементе хамилтонијана H_1 унутар потпростора $V^{(E_0,L,S,J)}$ се могу наћи уз помоћ пројекционог теорема

$$\boldsymbol{L} = \frac{\langle \boldsymbol{LJ} \rangle}{\hbar^2 J(J+1)} \boldsymbol{J} \tag{3.726}$$

[36] Ова хипотеза је валидна за одређени број лаких атома код којих је интеракција $\boldsymbol{LS}$ типа.

$$\boldsymbol{S} = \frac{\langle \boldsymbol{SJ} \rangle}{\hbar^2 J(J+1)} \boldsymbol{J} \tag{3.727}$$

Ако приметимо да из $\boldsymbol{J}^2 = (\boldsymbol{L} + \boldsymbol{S})^2$ следи

$$\boldsymbol{LS} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{S}^2 - \boldsymbol{L}^2) \tag{3.728}$$

можемо добити следеће корисне релације

$$\boldsymbol{JL} = \boldsymbol{L}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}) = \boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{LS} = \boldsymbol{L}^2 + \frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{S}^2 - \boldsymbol{L}^2) \tag{3.729}$$

$$\boldsymbol{SJ} = \boldsymbol{S}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}) = \boldsymbol{S}^2 + \boldsymbol{LS} = \boldsymbol{S}^2 + \frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{S}^2 - \boldsymbol{L}^2) \tag{3.730}$$

Унутар потпростора $V^{(E_0,L,S,J)}$ су средње вредности оператора $\boldsymbol{LJ}$ и $\boldsymbol{SJ}$ једнаке

$$\langle \boldsymbol{LJ} \rangle_{E_0,L,S,J} = \hbar^2 L(L+1) + \frac{\hbar^2}{2}(J(J+1) - S(S+1) - L(L+1)) \tag{3.731}$$

$$\langle \boldsymbol{SJ} \rangle_{E_0,L,S,J} = \hbar^2 S(S+1) + \frac{\hbar^2}{2}(J(J+1) - S(S+1) - L(L+1)) \tag{3.732}$$

Тако да се хамилтонијан H_1 у овом потпростору може написати као

$$H_1 = -\frac{\mu_B}{\hbar} B \underbrace{\left[\frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}\right]}_{g_J} J_z \tag{3.733}$$

, где је g_J Ландеов фактор произвољног атомског нивоа.

У првом реду теорије пертурбације је поправка енергије

$$\begin{aligned} \langle E_0, L, S, J, M | H_1 | E_0, L, S, J, M \rangle &= -\frac{\mu_B}{\hbar} B g_J \langle E_0, L, S, J, M | J_z | E_0, L, S, J, M \rangle \\ &= -\frac{\mu_B}{\hbar} B g_J M \hbar = -\mu_B B g_J M \end{aligned} \tag{3.734}$$

тако да се добија еквидистантно цепање енергетског нивоа E_0 које зависи од магнетног квантног броја M.

3.11 Идентичне честице

1. Разматрајмо две честице са истим спином; нека су њихови спински простори стања, $V^{(1)}$ и $V^{(2)}$ изоморфни. Базис у простору стања прве честице $\{|u_i\rangle\}$, је исти као и базис у простору стања друге честице, због изоморфности. Користећи тензорски производ, можемо конструисати базис у укупном простору стања $V = V^{(1)} \otimes V^{(2)}$ обе честице

$$\{|1 : u_i; 2 : u_j\rangle\} \tag{3.735}$$

Како смо индексима 1 и 2 означили који вектор припада ком простору стања, можемо писати базисне векторе на следећи начин

$$|2:u_j;1:u_i\rangle = |1:u_i;2:u_j\rangle \tag{3.736}$$

Приметимо да је

$$|1:u_i;2:u_j\rangle \neq |1:u_j;2:u_i\rangle \quad \text{за } i \neq j \tag{3.737}$$

Пермутациони оператор дефинишемо као линеарни оператор чије је дејство на базисне векторе дато са

$$P_{21}|1:u_i;2:u_j\rangle = |2:u_i;1:u_j\rangle = |1:u_j;2:u_i\rangle \tag{3.738}$$

ОСОБИНЕ ПЕРМУТАЦИОНОГ ОПЕРАТОРА

Директно из дефиниције оператора P_{21} видимо да је $P_{21}^2 = 1$, тако да можемо закључити да је оператор P_{21} сам себи инверз.

Показаћемо и да је P_{21} хермитски оператор, тј. да важи $P_{21}^\dagger = P_{21}$.

Матрични елементи оператора P_{21} у базису $\{|1:u_i;2:u_j\rangle\}$ су

$$\langle 1:u_{i'};2:u_{j'}|P_{21}|1:u_i;2:u_j\rangle = \langle 1:u_{i'};2:u_{j'}|1:u_j;2:u_i\rangle = \delta_{i',j}\delta_{i,j'} \tag{3.739}$$

Матрични елементи оператора $P_{21}^\dagger$ су, по дефиницији

$$\begin{aligned}\langle 1:u_{i'};2:u_{j'}|P_{21}^\dagger|1:u_i;2:u_j\rangle &= (\langle 1:u_i;2:u_j|P_{21}|1:u_{i'};2:u_{j'}\rangle)^* \\ &= (\langle 1:u_i;2:u_j|1:u_{j'};2:u_{i'}\rangle)^* \\ &= \delta_{i,j'}\delta_{i',j}\end{aligned} \tag{3.740}$$

Како су сви матрични елементи оператора P_{21} једнаки свим матричним елементима $P_{21}^\dagger$, долазимо до закључка да је $P_{21}^\dagger = P_{21}$-*хермитски оператор.*

Оператор P_{21} је *унитаран* јер важи $P_{21}^\dagger P_{21} = P_{21}P_{21}^\dagger = 1$.

Ако изаберемо базис формиран од заједничих својствених базиса оператора координате $\boldsymbol{r}$ и z- пројекције спина s_z, израз (3.738) можемо да напишемо у облику

$$P_{21}|1:\boldsymbol{r},\epsilon;2:\boldsymbol{r}',\epsilon'\rangle = |1:\boldsymbol{r}',\epsilon';2:\boldsymbol{r},\epsilon\rangle \tag{3.741}$$

Свако стање $|\psi\rangle$ у том базису можемо да напишемо у следећем облику

$$|\psi\rangle = \sum_{\epsilon,\epsilon'}\int\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\psi_{\epsilon,\epsilon'}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')|1:\boldsymbol{r},\epsilon;2:\boldsymbol{r}',\epsilon'\rangle \tag{3.742}$$

Ако на $|\psi\rangle$ делујемо бра вектором $\langle 1:\boldsymbol{r}_1,\epsilon_1;2,\boldsymbol{r}_2,\epsilon_2|$ добићемо

$$\begin{aligned}&\langle 1:\boldsymbol{r}_1,\epsilon_1;2:\boldsymbol{r}_2,\epsilon_2|\psi\rangle \\ &= \sum_{\epsilon,\epsilon'}\int\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\psi_{\epsilon,\epsilon'}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\langle 1:\boldsymbol{r}_1,\epsilon_1;2:\boldsymbol{r}_2,\epsilon_2|1:\boldsymbol{r},\epsilon;2:\boldsymbol{r}',\epsilon'\rangle \\ &= \sum_{\epsilon,\epsilon'}\int\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\psi_{\epsilon,\epsilon'}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\delta_{\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}}\delta_{\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}'}\delta_{\epsilon_1,\epsilon}\delta_{\epsilon_2,\epsilon'} \\ &= \psi_{\epsilon_1,\epsilon_2}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\end{aligned} \tag{3.743}$$

Дејство пермутационог оператора P_{21} на произвољан кет $|\psi\rangle$ је

$$\begin{aligned} P_{21}|\psi\rangle &= \sum_{\epsilon,\epsilon'}\int\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\psi_{\epsilon,\epsilon'}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')P_{21}|1:\boldsymbol{r},\epsilon;2:\boldsymbol{r}',\epsilon'\rangle \\ &= \sum_{\epsilon,\epsilon'}\int\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\psi_{\epsilon,\epsilon'}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')|1:\boldsymbol{r}',\epsilon';2:\boldsymbol{r},\epsilon\rangle \end{aligned} \tag{3.744}$$

Ако направимо смену варијабли $\epsilon \leftrightarrow \epsilon'$, $\boldsymbol{r} \longleftrightarrow \boldsymbol{r}'$, последња једначина постаје

$$P_{21}|\psi\rangle = \sum_{\epsilon,\epsilon'}\int\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\psi_{\epsilon',\epsilon}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})|1:\boldsymbol{r},\epsilon;2:\boldsymbol{r}',\epsilon'\rangle \tag{3.745}$$

Деловањем бра вектора $\langle 1:\boldsymbol{r}_1,\epsilon_1;2:\boldsymbol{r}_2,\epsilon_2|$ на $P_{21}|\psi\rangle$ добијамо

$$\begin{aligned} &\langle 1:\boldsymbol{r}_1,\epsilon_1;2:\boldsymbol{r}_2,\epsilon_2|P_{21}|\psi\rangle \\ &= \sum_{\epsilon,\epsilon'}\int\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\psi_{\epsilon,\epsilon'}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\langle 1:\boldsymbol{r}_1,\epsilon_1;2:\boldsymbol{r}_2,\epsilon_2|1:\boldsymbol{r},\epsilon;2:\boldsymbol{r}',\epsilon'\rangle \\ &= \sum_{\epsilon,\epsilon'}\int\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\psi_{\epsilon,\epsilon'}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\delta_{\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}'}\,\delta_{\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}}\,\delta_{\epsilon_1,\epsilon}\,\delta_{\epsilon_2,\epsilon'} \\ &= \psi_{\epsilon_1,\epsilon_2}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) \end{aligned} \tag{3.746}$$

Са друге стране, ако P_{21} делује на бра вектор $\langle 1:\boldsymbol{r}_1,\epsilon_1;2:\boldsymbol{r}_2,\epsilon_2|$, а $|\psi\rangle$ напишемо као у једначини (3.742), добићемо

$$\begin{aligned} &\langle 1:\boldsymbol{r}_1,\epsilon_1;2:\boldsymbol{r}_2,\epsilon_2|P_{21}|\psi\rangle \\ &= \langle 1:\boldsymbol{r}_2,\epsilon_2;2:\boldsymbol{r}_1,\epsilon_1|\psi\rangle \\ &= \sum_{\epsilon,\epsilon'}\int\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\psi_{\epsilon,\epsilon'}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\langle 1:\boldsymbol{r}_2,\epsilon_2;2:\boldsymbol{r}_1,\epsilon_1|1:\boldsymbol{r},\epsilon;2:\boldsymbol{r}',\epsilon'\rangle \\ &= \sum_{\epsilon,\epsilon'}\int\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\psi_{\epsilon,\epsilon'}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\delta_{\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}}\,\delta_{\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}'}\,\delta_{\epsilon_2,\epsilon}\,\delta_{\epsilon_1,\epsilon'} \\ &= \psi_{\epsilon_2,\epsilon_1}(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1) \end{aligned} \tag{3.747}$$

На основу последње две једначине можемо да закључимо

$$\psi_{\epsilon_1,\epsilon_2}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = \psi_{\epsilon_2,\epsilon_1}(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1) \tag{3.748}$$

СИМЕТРИЧНИ И АНТИСИМЕТРИЧНИ КЕТОВИ; СИМЕТРИЗАТОР И АНТИСИМЕТРИЗАТОР

Како је $P_{21}^\dagger = P_{21}$, својствене вредности пермутационог оператора су реалне. Зато што важи $P_{21}^2 = 1$, својствене вредности су ± 1.

Својствени вектори P_{21} додељени својственој вредности 1 су симетрични, док су својствени вектори за својствену вредност -1 антисиметрични кетови

$$P_{21}|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle \tag{3.749}$$

$$P_{21}|\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle \tag{3.750}$$

Размотримо два оператора

$$S = \frac{1}{2}(1 + P_{21}) \tag{3.751}$$

$$A = \frac{1}{2}(1 - P_{21}) \tag{3.752}$$

Ови оператори су пројектори јер важи

$$S^2 = \frac{1}{4}(1+P_{21})^2 = \frac{1}{4}(1+P_{21}+P_{21}+\underbrace{P_{21}^2}_{=1}) = \frac{1}{4}(2+2P_{21}) = \frac{1}{2}(1+P_{21}) = S \tag{3.753}$$

$$A^2 = \frac{1}{4}(1-P_{21})^2 = \frac{1}{4}(1-P_{21}-P_{21}+\underbrace{P_{21}^2}_{=1}) = \frac{1}{4}(2-2P_{21}) = \frac{1}{2}(1-P_{21}) = A \tag{3.754}$$

Слично, можемо да проверимо да су ови оператори хермитски, тј. да важи $S^\dagger = S$ и $A^\dagger = A$, као и да су пројектори на ортогоналне потпросторе јер је

$$SA = AS = 0 \tag{3.755}$$

Ови декомпонују простор стања V на директан збир симетричног и антисиметричног потпростора

$$V = V_S \oplus V_A \tag{3.756}$$

, јер пројектори S и A декомпонују јединицу

$$1 = S + A \tag{3.757}$$

Ако је $|\psi\rangle$ произвољан кет у простору стања V, $S|\psi\rangle$ је симетричан кет, док је $A|\psi\rangle$ антисиметричан кет, и лако се проверава да важи

$$P_{21}S|\psi\rangle = SP_{21}|\psi\rangle = S|\psi\rangle \tag{3.758}$$

$$P_{21}A|\psi\rangle = AP_{21}|\psi\rangle = -A|\psi\rangle \tag{3.759}$$

ТРАНСФОРМАЦИЈА ОПСЕРВАБЛИ ПОД ПЕРМУТАЦИЈАМА

Размотримо опсерваблу $B(1)$, почетно дефинисану у $V^{(1)}$ и потом проширену у V. Нека је у $V^{(1)}$ базис сачињен од својствених вектора $\{|u_i\rangle\}$(одговарајуће својствене вредности ћемо означавати са u_i).

Занима нас дејство оператора $P_{21}B(1)P_{21}^\dagger$ на произвољан базисни вектор простора стања V

$$\begin{aligned} P_{21}B(1)P_{21}^\dagger|1:u_i;2:u_j\rangle &= P_{21}B(1)|1:u_j;2:u_i\rangle = u_jP_{21}|1:u_j;2:u_i\rangle \\ &= u_j|1:u_i;2:u_j\rangle \end{aligned} \tag{3.760}$$

Исти резултат добијамо и деловањем опсервабле $B(2)$ на исти базисни вектор. На основу тога закључујемо

$$P_{21}B(1)P_{21}^{\dagger} = B(2) \tag{3.761}$$

Слично, можемо показати

$$P_{21}B(2)P_{21}^{\dagger} = B(1) \tag{3.762}$$

У V постоје опсервабле као $B(1)+C(2)$ или $B(1)C(2)$ које истовремено укључују оба индекса

$$P_{21}[B(1)+C(2)]P_{21}^{\dagger} = B(2)+C(1) \tag{3.763}$$

$$P_{21}[B(1)C(2)]P_{21}^{\dagger} = B(2)C(1) \tag{3.764}$$

Овај резултат се може генерализовати на све опсервабле у V које се могу изразити помоћу опсервабли типа $B(1)$ и $C(2)$, и њих ћемо означавати са $\vartheta(1,2)$:

$$P_{21}\vartheta(1,2)P_{21}^{\dagger} = \vartheta(2,1) \tag{3.765}$$

Опсервабла $\vartheta_S(1,2)$ је симетрична уколико важи

$$\vartheta_S(1,2) = \vartheta_S(2,1) \tag{3.766}$$

За њих важи да је

$$P_{21}\vartheta_S(1,2)P_{21}^{\dagger} = \vartheta_S(2,1) = \vartheta_S(1,2) \Longrightarrow [P_{21}, \vartheta_S(1,2)] = 0 \tag{3.767}$$

Симетричне опсервабле комутирају са пермутацијама.

2. У спинском простору стања система сачињеног од Н идентичих честица можемо дефинисати $N!$ пермутационих оператора (један од њих је идентични оператор). За $N > 2$, особине пермутационих оператора су сложеније него за $N = 2$. Да би стекли увид у те промене, разматраћемо случај $N = 3$

СЛУЧАЈ $N = 3$

Разматрамо систем који се састоји од три честице. Базис у укупном простору стања је

$$\{|1:u_i; 2:u_j:3:u_k\rangle\} \tag{3.768}$$

Можемо дефинисати 6 пермутационих оператора

$$P_{123},\ P_{132},\ P_{213},\ P_{231},\ P_{312},\ P_{321}. \tag{3.769}$$

По дефиницији, оператор P_{npq}(где су n, p и q произвољне пермутације бројева 1, 2 и 3) је линеаран оператор чије је дејство на базисне векторе једнако

$$P_{npq}|1:u_i; 2:u_j; 3:u_k\rangle = |n:u_i; p:u_j; q:u_k\rangle \tag{3.770}$$

Деловање овог оператора можемо видети на примеру

$$P_{231}|1:u_i; 2:u_j; 3:u_k\rangle = |2:u_i; p:3_j; 1:u_k\rangle = |1:u_k; 2:u_i; 3:u_j\rangle \tag{3.771}$$

Пермутациони оператори чине групу!

1. P_{123} је идентични оператор.
2. Производ два пермутациона оператора је пермутациони оператор. Показаћемо нпр. да је $P_{312}P_{132} = P_{321}$

$$\begin{aligned} P_{312}P_{132}|1:u_i;2:u_j;3:u_k\rangle &= P_{312}|1:u_i;2:u_k;3:u_j\rangle = |3:u_i;1:u_k;2:u_j\rangle \\ &= |1:u_k;2:u_j;3:u_i\rangle = P_{213}|1:u_i;2:u_j;3:u_k\rangle \end{aligned} \tag{3.772}$$

3. Сваки пермутациони оператор има свој инверз нпр. $P_{123}^{-1} = P_{123}$...
4. Деловање пермутационих оператора је асоцијативно.

Транспозиција је пермутација која мења две честице без промене осталих. Оператори транспозиције су хермицки оператори, и једнаки су свом инверзу, тако да су и унитарни оператори.[37] Оно што је битно је чињеница да се *сваки пермутациони оператор може разбити на производ одређеног броја оператора транспозиције.*

Ова декомпозиција није једнозначна. Ипак, за дату пермутацију, може се показати да је број транспозиција у који се неки пермутациони оператор може поделити увек одређене парности, или паран или непаран. У једначини (3.769) су парне пермутације прва ,четврта и пета, остале пермутације су непарне. Ако имамо N честица, тада од $N!$ пермутационих оператора, једна половина је парна, док је друга половина непарна.

Пермутациони оператори су производ транспозиционих оператора који су унитарни, па су и сами унитарни. Ипак, нису хермицки, јер транспозициони оператори не комутирају. Приметимо да је ађунговани оператор датог пермутационог оператора исте парности као и тај оператор, и једнак је производу истих транспозиционих оператора, само у обрнутом редоследу.

КОМПЛЕТНО СИМЕТРИЧНИ И АНТИСИМЕТРИЧНИ КЕТОВИ; СИМЕТРИЗАТОР И АНТИСИМЕТРИЗАТОР

Нека је P_α произвољни пермутациони оператор додељен сиситему Н идентичних честица у спинском простору; α представља произвољну пермутацију првих N бројева. Кет $|\psi_S\rangle$ који задовољава

$$P_\alpha|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle \tag{3.773}$$

за било коју пермутацију α назива се тотално симетрични кет. Слично, тотално антисиметрични кет $|\psi\rangle$ је онај који задовољава

$$P_\alpha|\psi_A\rangle = \epsilon_\alpha|\psi_A\rangle \tag{3.774}$$

, где је $\epsilon_\alpha = \pm 1$ у зависности од тога да ли говоримо о парној или непарној пермутација, редом.

[37]Приметимо да је пермутација P_{12} заправо транспозиција

Скуп комплетно симетричних кетова гради векторски потпростор $V^{(s)}$ простора V, а скуп свих комплетно антисиметричних кетова потпростор $V^{(A)}$.

Конструисаћемо два оператора

$$S = \frac{1}{N!}\sum_\alpha P_\alpha \tag{3.775}$$

и

$$A = \frac{1}{N!}\sum_\alpha \epsilon_\alpha P_\alpha \tag{3.776}$$

где је сумација извршена по свих $N!$ пермутација, и $\epsilon_\alpha = \pm 1$, по дефиницији. Показаћемо да су S и A пројектори на $V^{(S)}$ и $V^{(A)}$, и зову се симетризатор и антисиметризатор. Како је

$$S^\dagger = \frac{1}{N!}\sum_\alpha P_\alpha^\dagger \tag{3.777}$$

Како је адјунговани оператор неког пермутационог оператора неки други пермутациони оператор, сума свих адјунгованих пермутација ће нам дати суму свих пермутационих оператора, али у различитом редоследу.

$$S^\dagger = \frac{1}{N!}\sum_\alpha P_\alpha^\dagger = \frac{1}{N!}\sum_\beta P_\beta = S \tag{3.778}$$

Слично, показујемо и да је оператор A хермитски

$$A^\dagger = \frac{1}{N!}\sum_\alpha \epsilon_\alpha P_\alpha^\dagger = \frac{1}{N!}\sum_\beta \epsilon_\beta P_\beta = A \tag{3.779}$$

У претходној једначини смо искористили $\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta$, јер се и P_α и P^β састоје од истог броја оператор транспозиције, само у обрнутом редоследу.

Ако је P_{α_0} произвољна пермутација, можемо показати

$$P_{\alpha_0} S = \frac{1}{N!}\sum_\alpha P_{\alpha_0} P_\alpha = \frac{1}{N!}\sum_\beta P_\beta = S \tag{3.780}$$

$$\begin{aligned} P_{\alpha_0} A &= \frac{1}{N!}\sum_\alpha P_{\alpha_0}\epsilon_\alpha P_\alpha = \frac{1}{N!}\sum_\alpha P_{\alpha_0} \underbrace{\epsilon_{\alpha_0}^2}_{=1} \epsilon_\alpha P_\alpha \\ &= \frac{1}{N!}\epsilon_{\alpha_0}\sum_\beta \epsilon_\beta P_\beta \\ &= \epsilon_{\alpha_0} A \end{aligned} \tag{3.781}$$

На основу ових релација закључујемо

$$S^2 = \frac{1}{N!}\sum_\alpha P_\alpha S = \frac{1}{N!}\sum_\alpha S = \frac{1}{N!} S \sum_\alpha 1 = \frac{1}{N!} S N! = S \tag{3.782}$$

$$A^2 = \frac{1}{N!}\sum_\alpha \epsilon_\alpha P_\alpha A = \frac{1}{N!}\sum_\alpha \underbrace{\epsilon_\alpha^2}_{=1} A = \frac{1}{N!}A\sum_\alpha 1 = \frac{1}{N!}AN! = A \tag{3.783}$$

да су S^2 и A^2 пројектори. Ако искористимо да је $\sum_\alpha \epsilon_\alpha = 0$, јер је пола елемента од $N!$ једнако један, а друга половина једнака -1, добићемо да су S и A пројектори на ортогоналне потпросторе

$$SA = \frac{1}{N!}\sum_\alpha P_\alpha A = \frac{1}{N!}A\sum_\alpha \epsilon_\alpha = 0 \tag{3.784}$$

Слично се показује и $AS = 0$.

Оператори S и A су пројектори на потпросторе $V^{(S)}$ и $V^{(A)}$, редом, јер важе релације

$$P_\alpha \underbrace{S|\psi\rangle}_{|\psi_S\rangle} = \underbrace{S|\psi\rangle}_{|\psi_S\rangle} \tag{3.785}$$

$$P_\alpha \underbrace{A|\psi\rangle}_{|\psi_A\rangle} = \epsilon_\alpha \underbrace{A|\psi\rangle}_{|\psi_A\rangle} \tag{3.786}$$

Оно што треба напоменути је да за $N > 3$ симетризатор и антисиметризатор не чине декомпозицију јединице и укупан простор стања није директан збир симетричног и антисиметричног простора стања

$$S + A \neq 1, \qquad V \neq V^{(S)} \otimes V^{(A)} \tag{3.787}$$

ТРАНСФОРМАЦИЈА ОПСЕРВАБЛИ ПОД ПЕРМУТАЦИЈАМА

Знамо да се било који пермутациони оператор може разбити на одређени ‘број оператора транспозиције. Како су оператори транспозиције исте пророде као и оператор P_{21}, све што смо извели за њега важи и за остале транспозиционе операторе. Особине ових транспозиционих оператора можемо да искористимо да би утврдили понашање различитих опсервабли система када се помноже са леве стране произвољним пермутационим оператором P_α и са десне стране оператором $P^\dagger(\alpha)$.

Опсервабле $\vartheta_S(1, 2, ..., N)$ које су потпуно симетричне на замену индекса 1,2, ...,N комутирају са свим транспозиционим операторима, самим тим, и са свим пермутационим операторима

$$[\vartheta_S(1, 2, ..., N), P_\alpha] = 0 \tag{3.788}$$

3. *a)* Базис у спинском простору стања две честице спина 1/2 је

$$\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\} \tag{3.789}$$

Сада ћемо деловати симетризатором на базисне векторе и наћи сва симетрична стања.

$$S|++\rangle = \frac{1}{2}(1 + P_{12})|++\rangle = \frac{1}{2}(|++\rangle + |++\rangle) = |++\rangle \tag{3.790}$$

$$S|--\rangle = \frac{1}{2}(1+P_{12})|--\rangle = \frac{1}{2}(|--\rangle + |--\rangle) = |--\rangle \tag{3.791}$$

$$S|+-\rangle = \frac{1}{2}(1+P_{12})|+-\rangle = \frac{1}{2}(|+-\rangle + |-+\rangle) \tag{3.792}$$

Симетрично стање добијено у последњој једначини није нормирано, нормирањем добијамо $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle)$.

$$S|-+\rangle = \frac{1}{2}(|-+\rangle + |+-\rangle) \tag{3.793}$$

И ово стање није нормирано, нормирање нам даје $\frac{1}{\sqrt{2}}(|-+\rangle + |+-\rangle)$. Сада можемо наћи базис у симетричном делу простора стања две честице

$$\beta(V^{(S)}) = \{|++\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle), |--\rangle\} \tag{3.794}$$

Деловањем антисиметризатора на базисне векторе добијамо

$$A|++\rangle = \frac{1}{2}(1-P_{12})|++\rangle = \frac{1}{2}(|++\rangle - |++\rangle) = 0 \tag{3.795}$$

$$A|--\rangle = \frac{1}{2}(1-P_{12})|--\rangle = \frac{1}{2}(|--\rangle - |--\rangle) = 0 \tag{3.796}$$

$$A|+-\rangle = \frac{1}{2}(1-P_{12})|+-\rangle = \frac{1}{2}(|+-\rangle - |-+\rangle) \tag{3.797}$$

Ово стање није нормирано, нормирањем добијамо $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$.

$$A|-+\rangle = \frac{1}{2}(1-P_{12})|-+\rangle = \frac{1}{2}(|-+\rangle - |+-\rangle) \tag{3.798}$$

Нормирање нам даје $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$. Базис антисиметричног дела простора стања је одавде

$$\beta(V^{(A)}) = \{\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)\} \tag{3.799}$$

Видимо да важи $V = V^{(S)} \oplus V^{(A)}$.

б) Када имамо две честице спина 1, базис у спинском простору стања две честице је

$$\beta(V) = \{|++\rangle, |+0\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |-0\rangle, |--\rangle, |0+\rangle, |0-\rangle, |00\rangle\} \tag{3.800}$$

, где смо са $|0\rangle$, $|+\rangle$ и $|-\rangle$, редом, означили базисне векторе у једночестичном простору стања $|1,0\rangle$, $|1,1\rangle$ и $|1,-1\rangle$. Симетрична стања су

$$S|++\rangle = |++\rangle \tag{3.801}$$

$$S|--\rangle = |--\rangle \tag{3.802}$$

$$S|00\rangle = |00\rangle \tag{3.803}$$

$$S|+-\rangle = S|-+\rangle = \frac{1}{2}(|+-\rangle + |-+\rangle) \tag{3.804}$$

Када нормирамо ово симетрично стање, добијамо $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle)$.

$$S|+0\rangle = S|0+\rangle = \frac{1}{2}(|+0\rangle + |0+\rangle) \tag{3.805}$$

Нормирањем добијамо $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+0\rangle + |0+\rangle)$.

$$S|-0\rangle = S|0-\rangle = \frac{1}{2}(|-0\rangle + |0-\rangle) \tag{3.806}$$

Нормирање нам даје $\frac{1}{\sqrt{2}}(|-0\rangle + |0-\rangle)$. Базис у симетричном простору стања две честице је

$$\beta(V^{(S)}) = \left\{|++\rangle, |--\rangle, |00\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|+0\rangle+|0+\rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|-0\rangle+|0-\rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle+|-+\rangle)\right\} \tag{3.807}$$

Антисиметризацијом базисних вектора добијамо

$$A|++\rangle = A|--\rangle = A|00\rangle = 0 \tag{3.808}$$

$$A|+-\rangle = -A|-+\rangle = \frac{1}{2}(|+-\rangle - |-+\rangle) \tag{3.809}$$

Нормирањем добијамо $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$.

$$A|+0\rangle = -A|0+\rangle = \frac{1}{2}(|+0\rangle - |0+\rangle) \tag{3.810}$$

Нормирани вектор је $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+0\rangle - |0+\rangle)$.

$$A|-0\rangle = -A|0-\rangle = \frac{1}{2}(|-0\rangle - |0-\rangle) \tag{3.811}$$

Нормирање нам даје $\frac{1}{\sqrt{2}}(|-0\rangle - |0-\rangle)$. Базис у антисиметричном простору стања је

$$\beta(V^{(A)}) = \left\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|+0\rangle - |0+\rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|-0\rangle - |0-\rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)\right\} \tag{3.812}$$

Видимо да опет важи $V = V^{(S)} \oplus V^{(A)}$.

ТРИ ЧЕСТИЦЕ

а) Ако имамо три идентичне честице спина 1/2, базис у укупном спинском простору стања ће бити

$$\beta(V) = \{|+++\rangle, |++-\rangle, |+-+\rangle, |+--\rangle, |-++\rangle, |-+-\rangle, |--+\rangle, |---\rangle\} \tag{3.813}$$

Симетризатор S је једнак

$$S = \frac{1}{6}(P_{123} + P_{132} + P_{213} + P_{231} + P_{312} + P_{321}) \tag{3.814}$$

$$S|+++\rangle = |+++\rangle \tag{3.815}$$

$$S|---\rangle = |---\rangle \tag{3.816}$$

$$S|++-\rangle = S|+-+\rangle = S|-++\rangle = \frac{1}{3}(|++-\rangle + |+-+\rangle + |-++\rangle) \tag{3.817}$$

Нормирањем добијамо $\frac{1}{\sqrt{3}}(|++-\rangle + |+-+\rangle + |-++\rangle)$.

$$S|+--\rangle = S|--+\rangle = S|-+-\rangle = \frac{1}{3}(|+--\rangle + |--+\rangle + |-+-\rangle) \tag{3.818}$$

Нормирање $\frac{1}{\sqrt{3}}(|+--\rangle + |--+\rangle + |-+-\rangle)$. Базис у симетричном простору стања је

$$\begin{aligned} \beta(V^{(S)}) \;\; &= \;\; \{|+++\rangle, |---\rangle, \frac{1}{\sqrt{3}}(|++-\rangle + |+-+\rangle + |-++\rangle), \\ &\quad \frac{1}{\sqrt{3}}(|+--\rangle + |--+\rangle + |-+-\rangle)\} \end{aligned} \tag{3.819}$$

Антисиметризатор је једнак

$$A = \frac{1}{6}(P_{123} - P_{132} - P_{213} + P_{231} + P_{312} - P_{321}) \tag{3.820}$$

Деловањем A на базисне векторе добијамо

$$\begin{aligned} A|+++\rangle \;\; &= \;\; A|++-\rangle = A|+-+\rangle = A|-++\rangle = A|+--\rangle = A|--+\rangle \\ &= \;\; A|-+-\rangle = A|---\rangle = 0 \end{aligned} \tag{3.821}$$

Антисиметрича стања не постоје зато што је број честица већи од димензије простора стања.

Видимо да је у овом случају $V \neq V^{(S)} \oplus V^{(A)}$.

б) Ако имамо три идентичне честице спина 1, идентичном процедуром као и у претходним случајевима добијамо све симетричне и антисиметричне векторе.

Генерално, дејство симетризатора на произвољан кет $|u\rangle = |1:\varphi_1, 2:\varphi_2, ..., n:\varphi_n\rangle$ се може написати у облику Слејтерове детерминанте

$$A|u\rangle = \frac{1}{N!}\begin{pmatrix} |1:\varphi_1\rangle & |1:\varphi_2\rangle & \dots & |1:\varphi_n\rangle \\ |2:\varphi_1\rangle & |2:\varphi_2\rangle & \dots & |2:\varphi_n\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |n:\varphi_1\rangle & \dots & \dots & |n:\varphi_n\rangle \end{pmatrix}$$

Ако се две честице налазе у истим стањима $|\varphi_1\rangle$ и $|\varphi_2\rangle$ детерминанта ће имати две једнаке врсте и биће једнака нули. То је у складу са Паулијевим принципом искључења који каже да се два фермиона не могу наћи у истом стању.

4. Када имамо две честице, њихов и опбитални и спински простор стања се може поделити на директан збир симетричног и антисиметричог простора стања

$$V_{orb} = V_{orb}^{(S)} \oplus V_{orb}^{(A)} \tag{3.822}$$

$$V_{spin} = V_{spin}^{(S)} \oplus V_{spin}^{(A)} \tag{3.823}$$

Укупан простор стања је директан производ спинског и орбиталног простора стања

$$\begin{aligned} V & \\ &= V_{orb} \otimes V_{spin} = (V_{orb}^{(S)} \oplus V_{orb}^{(A)}) \otimes (V_{spin}^{(S)} \oplus V_{spin}^{(A)}) \\ &= (V_{orb}^{(S)} \otimes V_{spin}^{(S)}) \oplus (V_{orb}^{(S)} \otimes V_{spin}^{(A)}) \oplus (V_{orb}^{(A)} \otimes V_{spin}^{(S)}) \oplus (V_{orb}^{(A)} \otimes V_{spin}^{(A)}) \end{aligned} \tag{3.824}$$

Видимо да у простору стања V постоје само симетричне и антисиметричне таласне функције. Симетричне ако су и орбитална и спинска таласна функција симетричне или антисиметричне, а антисиметричне ако је једна таласна функција симетрична а друга антисиметрична. [38]

а) Орбитална стања су једнака

БОЗОНИ

Тада орбитална функција стања две бозона мора бити симетрична [39]

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi_f(\boldsymbol{r}_1)\psi_f(\boldsymbol{r}_2) \tag{3.825}$$

Спинска таласна функција мора бити симетрича да би укупна таласна ф-ја била симетрична [40]

$$X_{s_z,s_z'}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{s_z}^{(1)}\chi_{s_z'}^{(2)} + \chi_{s_z'}^{(1)}\chi_{s_z}^{(2)}) \tag{3.826}$$

Таласна функција бозона у овом случају је

$$\Psi_{boz} = \Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) X_{s_z,s_z'}^{+} \tag{3.827}$$

ФЕРМИОНИ

Укупна таласна функција је антисиметрична, како је орбитална симетрична, мора спинска функција бити антисиметрична

$$X_{s_z,s_z'}^{-} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{s_z}^{(1)}\chi_{s_z'}^{(2)} - \chi_{s_z'}^{(1)}\chi_{s_z}^{(2)}) \tag{3.828}$$

[38] Оно што је битно напоменути је да ово не важи за три или више честице, јер њихов орбитални или спински простор стања није директан збир симетричног и антисиметричног простора стања. У том случају, симетризатор и антисиметризатор делују на укупну функцију стања а не одвојено на орбиталну и спинску.

[39] антисиметрична функција стања не постоји, јер су честице у истом орбиталном стању.

[40] У овом задатку претпостављамо да су спинска стања различита

Таласна функција фермиона је

$$\Psi_{fer} = \Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) X^-_{s_z, s'_z} \tag{3.829}$$

б) Орбитална стања су различита

У овом случају оритална таласна функција може бити и симетрична и антисиметрична

$$\Phi^{\pm}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{f_1}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{f_2}(\boldsymbol{r}_2) \pm \psi_{f_2}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{f_1}(\boldsymbol{r}_2)) \tag{3.830}$$

као и спинска функција

$$X^{\pm}_{s_z, s'_z} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi^{(1)}_{s_z}\chi^{(2)}_{s'_z} \pm \chi^{(1)}_{s'_z}\chi^{(2)}_{s_z}) \tag{3.831}$$

тако да таласне функције фермиона и бозона могу бити

$$\Psi_{boz,1} = \Phi^+(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) X^+_{s_z, s'_z}, \quad \Psi_{boz,2} = \Phi^-(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) X^-_{s_z, s'_z} \tag{3.832}$$

$$\Psi_{fer,1} = \Phi^+(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) X^-_{s_z, s'_z}, \quad \Psi_{fer,2} = \Phi^-(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) X^+_{s_z, s'_z} \tag{3.833}$$

5. Хамилтонијан система идентичних честица(бозона или фермиона) је увек симетричан у односу на пермутације тих честица. Разматрамо систем у коме су честице независне, тј. нема међусобне интеракције. Одговарајући хамилтонијан је онда сума једночестичних хамилтонијана у форми

$$H(1, 2, ..., N) = h(1) + h(2) + ...h(N) \tag{3.834}$$

$h(1)$ је функција само опсервабли које су додељене честици са редним бројем 1: чињеница да су све честице идентичне захтева да функција h буде исти за свих N термова. Да би одредили својствене вредности и својствена стања укупног хамилтонијана, морамо да знамо својствене вредности и стања једношестичног хамилтонијана

$$h(j)|\varphi_n\rangle = e_n|\varphi_n\rangle; \quad |\varphi_n\rangle \in V(j) \tag{3.835}$$

Претпоставићемо да је спектар $h(j)$ дискретан и недегенерисан.

Ако разматрамо систем идентичних бозона, физички својствени вектори хамилтонијана могу да се добију, симетризацијом тензорског производа N произвољних једночестичних стања

$$|\Phi^{(s)}_{n_1, \ldots, n_N}\rangle = c \sum_{\alpha} P_\alpha |1 : \varphi_{n_1}; ...; N : \varphi_{n_N}\rangle \tag{3.836}$$

а одговарајућа енергија је сума N једночестичних енергија

$$E_{n_1, \ldots, n_N} = e_{n_1} + ... + e_{n_N} \tag{3.837}$$

Ако је e_1 енергија основног стања хамилтонијана $h(1)$, и $|\varphi_1\rangle$ њему одговарајуће својствено стање; основно стање система се добија када се сви бозони налазе у стању $|\varphi_1\rangle$.

Енергија основног стања је онда

$$E_{1,\dots,1} = Ne_1 \tag{3.838}$$

а одговарајући вектор стања

$$|\varphi^{(S)}\rangle = |1:\varphi_1; 2:\varphi_1; ...; N:\varphi_1\rangle \tag{3.839}$$

Ако разматрамо систем N идентичних фермиона није могуће да две честице буду у истом стању због Паулијевог принципа искључења. Основно стање система идентичних фермиона добијамо за енергије појединачних честица1 које су написане у растућем редоследу

$$e_1 < e_2 < ... < e_N \tag{3.840}$$

тако да основно стање има енергију

$$E_{1,2,\dots,N} = e_1 + e_2 + ...e_N \tag{3.841}$$

и описује се нормализованим физичким кетом

$$|\Phi^{(A)}_{1,2,\dots,N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{pmatrix} |1:\varphi_1\rangle & |1:\varphi_2\rangle & \dots & |1:\varphi_N\rangle \\ |2:\varphi_1\rangle & |2:\varphi_2\rangle & \dots & |2:\varphi_N\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |N:\varphi_1\rangle & \dots & \dots & |N:\varphi_N\rangle \end{pmatrix} \tag{3.842}$$

Највећа једночестична енергија e_N се назива Фермијева енергија система.

6. Разматраћемо само вероватноћу да се две честиће нађу у потпростору $z < 0$, вероватноћу да се једнавчестица нађе у потпростору $z > 0$ препоручујем за вежбу.

БОЗОНИ

Како бозони имају спин 0, налазе се у истом спинском стању $|0,0\rangle$, и њихова двочестична спинска функција стања мора бити симетрична. На основу тога закључујемо и да орбитална функција стања мора бити симетрична

$$|\Phi^{(orb)}_{boz}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi\chi\rangle + |\chi\psi\rangle) \tag{3.843}$$

Вероватноћа да се обе честице нађу у потпростору $z > 0$ је

$$\vartheta(z_1 > 0, z_2 > 0, P_{z_1>0} \otimes P_{z_2>0}, |\Phi^{(orb)}_{boz}\rangle) = \langle\Phi^{(orb)}_{boz}|P_{z_1>0} \otimes P_{z_2>0}|\Phi^{(orb)}_{boz}\rangle \tag{3.844}$$

, а $P_{z_1>0}$ и $P_{z_2>0}$ су, редом, пројектори на потпросторе $z_1 > 0$ и z_2 прве и друге честице

$$P_{z_1>0} = \int d\boldsymbol{r}_1|\boldsymbol{r}_1\rangle\langle\boldsymbol{r}_1|, \quad P_{z_2>0} = \int d\boldsymbol{r}_2|\boldsymbol{r}_2\rangle\langle\boldsymbol{r}_2| \tag{3.845}$$

Сада вероватноћу можемо написати у облику [41]

$$
\begin{aligned}
&\vartheta(z_{1,2}>0, P_{z_1>0}\otimes P_{z_2>0}, |\Phi^{(orb)}_{boz}\rangle)\\
&= \frac{1}{2}\int\int_{z_1,z_2>0} d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 (\langle\psi\chi| + \langle\chi\psi|)\, |\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2\rangle\langle\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2|\, (|\psi\chi\rangle + |\chi\psi\rangle)\\
&= \frac{1}{2}\int\int_{z_{1,2}>0} d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \Big(\langle\psi|\boldsymbol{r}_1\rangle\langle\chi|\boldsymbol{r}_2\rangle + \langle\chi|\boldsymbol{r}_1\rangle\langle\psi|\boldsymbol{r}_2\rangle\Big)\Big(\langle\boldsymbol{r}_1|\psi\rangle\langle\boldsymbol{r}_2|\chi\rangle + \langle\boldsymbol{r}_1|\chi\rangle\langle\boldsymbol{r}_2|\psi\rangle\Big)\\
&= \frac{1}{2}\int\int_{z_{1,2}>0} d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \Bigg[|\langle\psi|\boldsymbol{r}_1\rangle|^2|\langle\chi|\boldsymbol{r}_2\rangle|^2 + |\langle\psi|\boldsymbol{r}_2\rangle|^2|\langle\chi|\boldsymbol{r}_1\rangle|^2\\
&\quad + \langle\psi|\boldsymbol{r}_1\rangle\langle\boldsymbol{r}_1|\chi\rangle\langle\chi|\boldsymbol{r}_2\rangle\langle\boldsymbol{r}_2|\psi\rangle + \langle\chi|\boldsymbol{r}_1\rangle\langle\boldsymbol{r}_1|\psi\rangle\langle\psi|\boldsymbol{r}_2\rangle\langle\boldsymbol{r}_2|\chi\rangle\Bigg]\\
&= \frac{1}{2}\Bigg\{\int_{z_1>0}|\langle\psi|\boldsymbol{r}_1\rangle|^2 d\boldsymbol{r}_1\int_{z_2>0}|\langle\chi|\boldsymbol{r}_2\rangle|^2 d\boldsymbol{r}_2 + \int_{z_1>0}|\langle\chi|\boldsymbol{r}_1\rangle|^2 d\boldsymbol{r}_1\int_{z_2>0}|\langle\psi|\boldsymbol{r}_2\rangle|^2 d\boldsymbol{r}_2\\
&\quad + \int_{z_1>0} d\boldsymbol{r}_1\langle\psi|\boldsymbol{r}_1\rangle\langle\boldsymbol{r}_1|\chi\rangle\int_{z_2>0} d\boldsymbol{r}_2\langle\chi|\boldsymbol{r}_2\rangle\langle\boldsymbol{r}_2|\psi\rangle\\
&\quad + \int_{z_1>0} d\boldsymbol{r}_1\langle\chi|\boldsymbol{r}_1\rangle\langle\boldsymbol{r}_1|\psi\rangle\int_{z_2>0} d\boldsymbol{r}_2\langle\psi|\boldsymbol{r}_2\rangle\langle\boldsymbol{r}_2|\chi\rangle\Bigg\}
\end{aligned}
\tag{3.846}
$$

Ако у другом сабирку направимо смену $\boldsymbol{r}_1 \leftrightarrow \boldsymbol{r}_2$, видимо да постаје једнак другом сабирку. Такође, ако у четвртом сабирку направимо исту смену, видимо да постаје једнак трећем, па је коначно решење

$$
\begin{aligned}
&\vartheta(z_{1,2}>0, P_{z_1>0}\otimes P_{z_2>0}, |\Phi^{(orb)}_{boz}\rangle)\\
&= \int_{z_1>0}|\langle\psi|\boldsymbol{r}_1\rangle|^2 d\boldsymbol{r}_1\int_{z_2>0}|\langle\chi|\boldsymbol{r}_2\rangle|^2 d\boldsymbol{r}_2 + \int_{z_1>0} d\boldsymbol{r}_1\langle\psi|\boldsymbol{r}_1\rangle\langle\boldsymbol{r}_1|\chi\rangle\int_{z_2>0} d\boldsymbol{r}_2\langle\chi|\boldsymbol{r}_2\rangle\langle\boldsymbol{r}_2|\psi\rangle
\end{aligned}
\tag{3.847}
$$

У случају различивих честица, орбитална таласна функција би била $\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi(\boldsymbol{r}_1)\chi(\boldsymbol{r}_2)$, и приликом изарачунавања вероватноће, добили бисмо само први члан у претходној једначини.

У случају фермиона; [42]како се налазе у једнаким спинским стањина, спинска функција мора бити симетрична, па је орбитална таласна функција антисиметрична. Резултат који се добијемо се разликује од случаја бозона само у томе што ће други члан у формули за вероватноћу код бозона, имати знак минус код фермиона.

[41]Тензорски производ $P_{z_1>0}\otimes P_{z_2>0}$ ћемо писати у облику $\int\int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2|\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2\rangle\langle\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2|$

[42]Претпостављамо, као и код бозона, да се фермиони налазе у истим спинским стањима

3.12 Приближне методе

1. Својствени проблем Хамилтонијана H_0 је

$$\begin{aligned} H_0|\varphi_1\rangle &= E_1|\varphi_1\rangle, \\ H_0|\varphi_2\rangle &= E_2|\varphi_2\rangle. \end{aligned} \tag{3.848}$$

Када на систем почне да делује пертурбација, нови Хамилтонијан је $H = H_0 + W$. Тај Хамилтонијан ћемо написати у базису $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$,

$$\begin{pmatrix} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} \end{pmatrix}. \tag{3.849}$$

Како је W хермитски оператор, мора да важи $W_{21}^* = W_{12}$ и да су дијагонални матрични елементи реални. Својствени базис и својствене енергије Хамитонијана H су,

$$\begin{aligned} E_+ &= \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) + \sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}, \\ E_- &= \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) - \sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}, \\ |\psi_+\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}|\varphi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}|\varphi_2\rangle, \\ |\psi_-\rangle &= -\sin\frac{\theta}{2}|\varphi_1\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}|\varphi_2\rangle, \end{aligned} \tag{3.850}$$

где је

$$\begin{aligned} tg\theta &= \frac{2|W_{12}|}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}}, \\ W_{21} &= |W_{21}|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}. \end{aligned} \tag{3.851}$$

Како нам дијагонални матрични елементи W_{11} и W_{22} не дају ефекте мешања између својствених стања H_0, а како ми желимо да пертурбацијом изазовемо прелаз из једног у друго својствено стање Хамилтонијана H_0, те матричне елементе ћемо занемарити. Систем се у почетном тренутку налазио у стању $|\varphi_1\rangle$ које ћемо написати као линеарну комбинацију стања $|\psi_+\rangle$ и $|\psi_-\rangle$,

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\psi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}|\psi_-\rangle. \tag{3.852}$$

Еволуција таласне функиције у времену изгледа као

$$|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_+t}{\hbar}}|\psi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_-t}{\hbar}}|\psi_-\rangle. \tag{3.853}$$

Сада можемо да израчунамо вероватноћу прелаза из стања $|\varphi_1\rangle$ у $|\varphi_2\rangle$ у произвољном тренутку t,

$$\begin{aligned}
P_{12}(t) &= |\langle\varphi_2|\psi(t)\rangle|^2 = |\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_+ t}{\hbar}}\langle\varphi_2|\psi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_- t}{\hbar}}\langle\varphi_2|\psi_-\rangle|^2 \\
&= |\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_+ t}{\hbar}} - \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_- t}{\hbar}}|^2 \\
&= \frac{1}{2}\sin^2\theta(1-\cos\frac{E_+ - E_-}{\hbar}t) \\
&= \sin^2\theta\sin^2\frac{E_+ - E_-}{2\hbar}t. \qquad (3.854)
\end{aligned}$$

Уколико заменимо вредности θ, E_+ и E_-, добијамо

$$P_{12}(t) = \frac{4|W_{12}|^2}{4|W_{12}|^2 + (E_1 - E_2)^2}\sin^2(\sqrt{4|W_{12}|^2 + (E_1 - E_2)^2}\frac{t}{2\hbar}). \qquad (3.855)$$

Видимо да вероватноће прелаза осцилује са временом (Рабијеве осцилације). Формула коју смо извели се у литератури назива Рабијева формула.Максимална вредност вероватноће прелаза је једнака

$$P_{12}^{max} = \frac{4|W_{12}|^2}{4|W_{12}|^2 + (E_1 - E_2)^2}, \qquad (3.856)$$

и добија се када синус из једначине 3.855 достиже вредност 1.

2. У првом реду теорије пертурбације поправка енергије првог побуђеног стања је

$$\begin{aligned}
E_1^{(1)} &= \langle 1|\hat{H}'|1\rangle = \langle 1|\alpha\hat{x}^3|1\rangle = \alpha(\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{3}{2}}\langle 1|(a+a^\dagger)^3|1\rangle \\
&= \alpha(\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{3}{2}}\langle 1|a^\dagger a^\dagger a^\dagger + aaa + a^\dagger a^\dagger a + a^\dagger a a^\dagger + a^\dagger a^\dagger a + aaa^\dagger + a^\dagger aa + aa^\dagger a|1\rangle \\
&= 0, \qquad (3.857)
\end{aligned}$$

јер су сви матрични елементи једнаки 0.

У другом реду теорије пертурбације, поправка енергије првог побуђеног стања је

$$E_1^{(2)} = \sum_{m\neq 1}\frac{|\langle m|\hat{H}'|1\rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m\neq 1}\frac{|\langle m|\alpha(\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{3}{2}}(a+a^\dagger)^3|1\rangle|^2}{\frac{3}{2}\hbar\omega - \hbar\omega(m+\frac{1}{2})}. \qquad (3.858)$$

Ненулти матрични елементи су

$$\begin{aligned}
\langle 4|a^\dagger a^\dagger a^\dagger|1\rangle &= 2\sqrt{6}, \\
\langle 2|a^\dagger a^\dagger a + a^\dagger a a^\dagger + a a^\dagger a^\dagger|1\rangle &= 6\sqrt{2}, \\
\langle 0|aaa^\dagger + aa^\dagger a|1\rangle &= 3, \qquad (3.859)
\end{aligned}$$

тако да је поправка енергије

$$\begin{aligned}E_1^{(2)} &= \alpha^2(\frac{\hbar}{2m\omega})^3\cdot \\ &\cdot\Big[\frac{|\langle 4|a^\dagger a^\dagger a^\dagger|1\rangle|^2}{\frac{3}{2}\hbar\omega-\frac{9}{2}\hbar\omega}+\frac{|\langle 2|a^\dagger a^\dagger a+a^\dagger a a^\dagger+a a^\dagger a^\dagger|1\rangle|^2}{\frac{3}{2}\hbar\omega-\frac{5}{2}\hbar\omega}+\frac{|\langle 0|a a a^\dagger+a a^\dagger a|1\rangle|^2}{\frac{3}{2}\hbar\omega-\frac{1}{2}\hbar\omega}\Big] \\ &= \alpha^2(\frac{\hbar}{2m\omega})^3\Big[\frac{24}{-3\hbar\omega}+\frac{72}{-\hbar\omega}+\frac{9}{\hbar\omega}\Big] \\ &= -71\alpha^2\frac{\hbar^2}{8m^3\omega^4}.\end{aligned} \tag{3.860}$$

3. Својствене функције и својствене енергије непертурбованог Хамилтонијана су

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x,\qquad E_n=\frac{\hbar^2(\frac{n\pi}{a})^2}{2m}. \tag{3.861}$$

Поправка енергије n- тог нивоа у првом реду теорије пертурбације је

$$\begin{aligned}E_n^{(1)} &= \langle n|V'|n\rangle=\int_0^a dx\psi_n^*(x)V'(x)\psi_n(x) \\ &= \frac{2}{a}\int_0^{\frac{a}{2}}\sin^2\frac{n\pi}{a}x\;2V_0\frac{x}{a}dx+\frac{2}{a}\int_{\frac{a}{2}}^a\sin^2\frac{n\pi}{a}x\;2V_0\frac{a-x}{a}dx \\ &= \frac{4V_0}{a^2}\Big[\underbrace{\int_0^{\frac{a}{2}}\sin^2\frac{n\pi}{a}x\;xdx}_{=I_1}+\underbrace{\int_{\frac{a}{2}}^a\sin^2\frac{n\pi}{a}x\;(a-x)dx}_{=I_2}\Big].\end{aligned} \tag{3.862}$$

Интеграл I_1 је једнак

$$\begin{aligned}I_1 &= \int_0^{\frac{a}{2}}\sin^2\frac{n\pi}{a}x\;xdx=\int_0^{\frac{a}{2}}\frac{1-\cos\frac{2n\pi}{a}x}{2}\;xdx=\frac{1}{2}\Big[\int_0^{\frac{a}{2}}xdx-\int_0^{\frac{a}{2}}\cos\frac{2n\pi}{a}x\;xdx\Big] \\ &= \frac{1}{2}\Big[\;\frac{x^2}{2}\Big|_0^{\frac{a}{2}}-(\frac{a}{2n\pi}\;\underbrace{x\sin\frac{2n\pi}{a}x\Big|_0^{\frac{a}{2}}}_{=0}-\frac{a}{2n\pi}\int_0^{\frac{a}{2}}\sin\frac{2n\pi}{a}x\;dx)\Big] \\ &= \frac{1}{2}\Big[\;\frac{a^2}{8}-\frac{a^2}{4n^2\pi^2}\cos\frac{2n\pi}{a}\Big|_0^{\frac{a}{2}}\;\Big] \\ &= \frac{1}{2}\Big[\;\frac{a^2}{8}-\frac{a^2}{4n^2\pi^2}\big((-1)^n-1\big)\Big].\end{aligned} \tag{3.863}$$

Да бисмо израчунали други интеграл I_2, пожељно је да направимо смену $t=a-x$, помоћу које I_2 добија форму

$$I_2=-\int_{-\frac{a}{2}}^0\sin^2\big(\frac{n\pi}{a}(a-t)\big)tdt=\int_0^{\frac{a}{2}}\sin^2\big(\frac{n\pi}{a}(a-t)\big)tdt. \tag{3.864}$$

Како је

$$\sin\big(\frac{n\pi}{a}(a-t)\big)=(-1)^n\sin\big(\frac{n\pi}{a}t\big)\Rightarrow\sin^2\big(\frac{n\pi}{a}(a-t)\big)=\sin^2\big(\frac{n\pi}{a}t\big), \tag{3.865}$$

Интеграл I_2,

$$I_2 = \int_0^{\frac{a}{2}} \sin^2\big(\frac{n\pi}{a}t\big)tdt = I_1, \tag{3.866}$$

је једнак интегралу I_1, тако да је поправка енергије

$$E_n^{(1)} = \frac{4V_0}{a^2}\Big[\ \frac{a^2}{8} - \frac{a^2}{4n^2\pi^2}\big((-1)^n - 1\big)\Big]. \tag{3.867}$$

За парне вредности $n = 2k$ поправка енергије је

$$E_{2k}^{(1)} = \frac{V_0}{2}, \tag{3.868}$$

док је за непарне $n = 2k+1$ поправка

$$E_{2k+1}^{(1)} = V_0\Big(\frac{1}{2} + \frac{2}{(2k+1)^2\pi^2}\Big). \tag{3.869}$$

4. Ако матрицу хамилтонијана напишемо у виду збира две матрице

$$\begin{pmatrix} 0 & 100 & 1 & 2 \\ 100 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 200 \\ 2 & 3 & 200 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 100 & 0 & 0 \\ 100 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 200 \\ 0 & 0 & 200 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 0 \\ 2 & 3 & 0 & 4 \end{pmatrix}, \tag{3.870}$$

видимо да прва матрица има елементе који су много већи од елемената друге матрице, тако да можемо сматрати да је прва матрица непертурбовани хамилтонијан $\hat{H}_0$, док друга матрица представља пертурбацију $\hat{H}'$. Решавањем својственог проблема непертурбованог хамилтонијана $\hat{H}_0$

$$\det|\hat{H}_0 - \lambda I_{4\times 4}| = 0, \tag{3.871}$$

налазимо својствене векторе и својствене вредности

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= 100 \Rightarrow \psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
\lambda_1 &= -100 \Rightarrow \psi_{-100} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
\lambda_1 &= 200 \Rightarrow \psi_{200} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \\
\lambda_1 &= -200 \Rightarrow \psi_{-200} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{3.872}$$

тако да је поправке енергије у првом реду теорије пертурбације, ако се систем налазио у својственим стањима ψ_{100}, ψ_{-100}, ψ_{200} и ψ_{-200}, редом

$$\begin{aligned} E^{(1)}_{100} &= \langle 100|H'|100\rangle = (\psi^*_{100})^T\ \hat{H}'\ \psi_{100} = \frac{1}{2}, \\ E^{(1)}_{-100} &= \langle -100|H'|-100\rangle = (\psi^*_{-100})^T\ \hat{H}'\ \psi_{-100} = \frac{1}{2}, \\ E^{(1)}_{200} &= \langle 200|H'|200\rangle = (\psi^*_{200})^T\ \hat{H}'\ \psi_{200} = \frac{7}{2}, \\ E^{(1)}_{-200} &= \langle -200|H'|-200\rangle = (\psi^*_{-200})^T\ \hat{H}'\ \psi_{-200} = \frac{7}{2}. \end{aligned} \tag{3.873}$$

5. У класичној механици 2Д ЛХО има два степена слободе и његов хамилтонијан је
$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_1^2x^2 + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_2^2y^2. \tag{3.874}$$
Ако говоримо о изотропном 2Д ЛХО, онда је $\omega_1 = \omega_2$. У овом задатку разматрамо изотропни 2Д ЛХО, али треба напоменути да је поступак налажења својствених енергија и својственог базиса неизотропног 2Д ЛХО идентичан.

Ми желимо да овај хамилтонијан квантујемо. Укупан простор стања ће бити

$$V_{x,y} = V_x \otimes V_y, \tag{3.875}$$

где је V_x простор стања првог степена слободе а V_y другог. Квантни 2Д ЛХО у овом простору стања је једнак

$$\hat{H} = \hat{H}_x \otimes I_y + I_x \otimes \hat{H}_y. \tag{3.876}$$

Ако су $|n\rangle_x$ својствени вектори оператора $\hat{H}_x$ у простору стања V_x,

$$\hat{H}_x|n\rangle_x = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|n\rangle_x, \tag{3.877}$$

и $|m\rangle_y$ својствени вектори оператора $\hat{H}_y$ у простору стања V_y,

$$\hat{H}_y|m\rangle_x = \hbar\omega(m + \frac{1}{2})|m\rangle_y, \tag{3.878}$$

онда је $|n\rangle_x \otimes |m\rangle_y$ својствени вектор изотропног 2Д ЛХО

$$\begin{aligned} \hat{H}|n\rangle_x \otimes |m\rangle_y &= (\hat{H}_x \otimes I_y + I_x \otimes \hat{H}_y)|n\rangle_x \otimes |m\rangle_y \\ &= (\hat{H}_x|n\rangle_x \otimes I_y|m\rangle_y + I_x|n\rangle_x \otimes \hat{H}_y|m\rangle_y) \\ &= \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|n\rangle_x \otimes |m\rangle_y + |n\rangle_x \otimes \hbar\omega(m + \frac{1}{2})|m\rangle_y \\ &= \hbar\omega(n + m + 1)|n\rangle_x \otimes |m\rangle_y, \end{aligned} \tag{3.879}$$

за својствену вредност
$$E_{n,m} = \hbar\omega(n + m + 1). \tag{3.880}$$

Енергија основног стања је $E_0 = \hbar\omega$ и њој одговара само један својствени вектор $|0\rangle_x \otimes |0\rangle_y$, дакле основно стање је недегенерисано. Енергији првог побуђеног нивоа $E_1 = 2\hbar\omega$ одговарају два својствена вектора $|0\rangle_x \otimes |1\rangle_y$ и $|1\rangle_x \otimes |0\rangle_y$, тако да је енергија првог побуђеног нивоа двоструко дегенерисана. Енергија другог побуђеног нивоа је $E_2 = 3\hbar\omega$ и њој одговарају три својствена вектора $|0\rangle_x \otimes |2\rangle_y$, $|1\rangle_x \otimes |1\rangle_y$ и $|2\rangle_x \otimes |0\rangle_y$ тако да је енергија другог побуђеног нивоа троструко дегенерисана. Због чињенице да је E_2 ниво дегенерисан, радићемо пертурбацију дегенерисаног нивоа да бисмо нашли раздавање овог нивоа под дејством пертурбације $\hat{H}' = \alpha\hat{x}\hat{y}$. У ту сврху решаваћемо секуларну једначину у базису другог побуђеног стања $\beta(E_2) = \{|0\rangle_x \otimes |2\rangle_y, |1\rangle_x \otimes |1\rangle_y, |2\rangle_x \otimes |0\rangle_y\}$[43],

$$\det|\begin{pmatrix} \langle 2,0|\hat{H}'|2,0\rangle & \langle 1,1|\hat{H}'|2,0\rangle & \langle 0,2|\hat{H}'|2,0\rangle \\ \langle 2,0|\hat{H}'|1,1\rangle & \langle 1,1|\hat{H}'|1,1\rangle & \langle 0,2|\hat{H}'|1,1\rangle \\ \langle 2,0|\hat{H}'|0,2\rangle & \langle 1,1|\hat{H}'|0,2\rangle & \langle 0,2|\hat{H}'|0,2\rangle \end{pmatrix} - E_2^{(1)} I_{3\times 3}| = 0. \tag{3.881}$$

Морамо израчунати свих 9 матричних елемента да бисмо нашли поправку енергије. Како је

$$\langle n_1, m_1|\hat{H}'|n_2, m_2\rangle = \alpha\langle n_1, m_1|\hat{x}\otimes\hat{y}|n_2, m_2\rangle = \frac{\alpha\hbar}{2m\omega}\langle n_1|a_x + a_x^\dagger|n_2\rangle\langle m_1|a_y + a_y^\dagger|m_2\rangle, \tag{3.882}$$

и

$$\begin{aligned} &\langle n_1|a_x + a_x^\dagger|n_2\rangle\langle m_1|a_y + a_y^\dagger|m_2\rangle = \\ &= (\sqrt{n_2}\delta_{n_1,n_2-1} + \sqrt{n_2+1}\delta_{n_1,n_2+1})(\sqrt{n_2}\delta_{n_1,n_2-1} + \sqrt{n_2+1}\delta_{n_1,n_2+1}), \end{aligned} \tag{3.883}$$

имамо образац помоћу којег можемо да израчунамо све матхричне елементе који улазе у секуларну једначину. Међу њима су ненулти следећи елементи:

$$\begin{aligned} \langle 1,1|\hat{H}'|2,0\rangle &= \frac{\alpha\hbar}{2m\omega}\sqrt{2}, \\ \langle 1,1|\hat{H}'|0,2\rangle &= \frac{\alpha\hbar}{2m\omega}\sqrt{2}, \\ \langle 2,0|\hat{H}'|1,1\rangle &= \frac{\alpha\hbar}{2m\omega}\sqrt{2}, \\ \langle 0,2|\hat{H}'|1,1\rangle &= \frac{\alpha\hbar}{2m\omega}\sqrt{2}. \end{aligned} \tag{3.884}$$

Ако дефинишемо величину $A = \frac{\alpha\hbar}{2m\omega}\sqrt{2}$, секуларна једначина (3.881) постаје

$$\det\begin{vmatrix} -E_2^{(1)} & A & 0 \\ A & -E_2^{(1)} & A \\ 0 & A & -E_2^{(1)} \end{vmatrix} = 0. \tag{3.885}$$

[43]Својствене векторе изотропног 2Д ЛХО ћемо писати понекад и у облику $|n\rangle_x \otimes |m\rangle_y = |n, m\rangle$ ради прегледности

На основу ове једначине налазимо поправке енергије,

$$\begin{aligned}(-E_2^{(1)})_1 &= -A\sqrt{2} = -\frac{\alpha\hbar}{m\omega},\\ (-E_2^{(1)})_2 &= -A\sqrt{2} = 0,\\ (-E_2^{(1)})_3 &= A\sqrt{2} = \frac{\alpha\hbar}{m\omega}.\end{aligned} \tag{3.886}$$

Дакле, увођењем пертурбације, други побуђени енергетски ниво се 'поцепао' на три нивоа, тако да је ова пертурбација отклонила дегенерацију.

6. Енергија основног стања $E_0 = \hbar\omega$ је недегенерисана и одговара јој стање $|0,0\rangle$. Енергији првог побуђеног стања $E_1 = 2E_0$ одговарају два стања $|1,0\rangle$ и $|0,1\rangle$ (дегенерација је 2), док енергији другог побуђеног стања $E_2 = 3E_0$ одговарају стања $|2,0\rangle$, $|1,1\rangle$ и $|0,2\rangle$ (трострука дегенерација). У базису

$$\{|0,0\rangle, |1,0\rangle, |0,1\rangle, |2,0\rangle, |1,1\rangle, |0,2\rangle\}, \tag{3.887}$$

ненулти матрични елементи су

$$\begin{aligned}\langle 0,0|H'|0,0\rangle &= \beta,\\ \langle 1,0|H'|1,0\rangle &= \langle 0,1|H'|0,1\rangle = 3\beta,\\ \langle 2,0|H'|2,0\rangle &= \langle 0,2|H'|0,2\rangle = 5\beta,\\ \langle 1,1|H'|1,1\rangle &= 9\alpha,\\ \langle 0,0|H'|2,0\rangle &= \langle 2,0|H'|0,0\rangle = \langle 0,0|H'|0,2\rangle = \langle 0,2|H'|0,0\rangle = \beta\sqrt{2},\\ \langle 2,0|H'|0,2\rangle &= \langle 0,2|H'|2,0\rangle = 2\beta,\end{aligned} \tag{3.888}$$

где је $\beta = \frac{\alpha\hbar}{2m\omega}$. Видимо да стања $|1,0\rangle$, $|0,1\rangle$ и $|1,1\rangle$ не интерагују са осталим стањима, док интеракција постоји између стања $|0,0\rangle$, $|0,2\rangle$ и $|2,0\rangle$. У првом реду теорије пертурбације дегенерисаног нивоа се разматра само интеракција између нивоа која описују исту енергју, т.ј. потребно је независно разматрати три Хамилтонијана. Први Хамитонијан је 1Д, тј. $H_1 = E_0 + \beta$. Он описује поправку енергије основног стања које је недегенерисано (зато је Хамилтонијан 1Д). Поправка енергије основног стања је једнака β, због ненултог матричног елемента $\langle 0,0|H'|0,0\rangle = \beta$. У другом случају разматрамо 2Д Хамилтонијан $H = H_0 + H'$ у базису $\{|1,0\rangle, |0,1\rangle\}$ (назваћемо га H_2),

$$H_2 = \begin{pmatrix} 2E_0 + 3\beta & 0 \\ 0 & 2E_0 + 3\beta \end{pmatrix}. \tag{3.889}$$

Видимо да стања међусобно не интерагују. Једина поправка долази од дијагоналних матричних елемената $\langle 1,0|H'|1,0\rangle$ и $\langle 0,1|H'|0,1\rangle = 3\beta$. У последњем случају разматрамо 3Д Хамилтонијан $H = H_0 + H'$ у базису $\{|2,0\rangle, |1,1\rangle, |0,2\rangle\}$ који ћемо назвати H_3,

$$H_3 = \begin{pmatrix} 3E_0 + 5\beta & 0 & 2\beta \\ 0 & 3E_0 + 9\beta & 0 \\ 2\beta & 0 & 3E_0 + 5\beta \end{pmatrix}. \tag{3.890}$$

Дијагонализацијом овог Хамилтонијана добијамо енергије $3E_0+3\beta$, $3E_0+9\beta$ и $3E_0+7\beta$. Нове енергије после првог реда теорије пертурбације дегенерисаног нивоа су

$$E_0+\beta,\ 2E_0+3\beta\ (\text{два пута}),\ 3E_0+3\beta,\ 3E_0+9\beta \text{ и } 3E_0+7\beta. \tag{3.891}$$

Сада ћемо разматрати Хамилтонијан $H = H_{2D\,HO}+H'$ у шестодимензионалном базису (3.887),

$$H = \begin{pmatrix} E_0+\beta & 0 & 0 & \beta\sqrt{2} & 0 & \beta\sqrt{2} \\ 0 & 2E_0+3\beta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2E_0+3\beta & 0 & 0 & 0 \\ \beta\sqrt{2} & 0 & 0 & 3E_0+5\beta & 0 & 2\beta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3E_0+9\beta & 0 \\ \beta\sqrt{2} & 0 & 0 & 2\beta & 0 & 3E_0+5\beta \end{pmatrix}. \tag{3.892}$$

Дијагонализацијом овог Хамитонијана добијамо својствене енергије $2E_0+3\beta$ (два пута), $3E_0+3\beta$, $3E_0+9\beta$ и $2E_0+4\beta\pm E_0\sqrt{1+\frac{6\beta}{E_0}+\frac{13\beta^2}{E_0^2}}$. Уколико третирамо H' као пертурбацију, мора да важи $\beta << E_0$, тако да $\sqrt{1+\frac{6\beta}{E_0}+\frac{13\beta^2}{E_0^2}}$ можемо да развијемо у ред до другог члана

$$\sqrt{1+\frac{6\beta}{E_0}+\frac{13\beta^2}{E_0^2}} \approx 1+\frac{3\beta}{E_0}-\frac{13\beta^2}{8E_0^2}+.... \tag{3.893}$$

Сада је

$$\begin{aligned} 2E_0+4\beta+E_0\sqrt{1+\frac{6\beta}{E_0}+\frac{13\beta^2}{E_0^2}} &\approx 3E_0+7\beta-\frac{13\beta^2}{8E_0}, \\ 2E_0+4\beta-E_0\sqrt{1+\frac{6\beta}{E_0}+\frac{13\beta^2}{E_0^2}} &\approx E_0+\beta+\frac{13\beta^2}{8E_0}. \end{aligned} \tag{3.894}$$

На основу последње једначине видимо да се поправке енергије у односу на (3.891) разликују само у члану који је квадратан по β, што је еквивалентно другом реду теорије пертурбације дегенерисаног нивоа.

7.

$$E(b) = \frac{\langle\psi_b|\hat{H}|\psi_b\rangle}{\langle\psi_b|\psi_b\rangle}. \tag{3.895}$$

Прво ћемо нормирати таласну функцију

$$1 = \langle\psi_b|\psi_b\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi_b(x)|^2 = A^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2}dx = A^2\sqrt{\frac{\pi}{2b}} \Rightarrow A = \sqrt[4]{\frac{2b}{\pi}} \tag{3.896}$$

Сада нас занима средња вредност хамилтонијана у стању $|\psi_b\rangle$,

$$\begin{aligned}
\langle\psi_b|\hat{H}|\psi_b\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\psi_b^*(x)\hat{H}(x)\psi_b(x) = |A|^2\int_{-\infty}^{\infty} dxe^{-bx^2}[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}]e^{bx^2} \\
&= |A|^2\int_{-\infty}^{\infty} dxe^{-bx^2}[\frac{\hbar^2}{2m}(2b-4b^2x^2)+\frac{m\omega^2x^2}{2}]e^{bx^2} \\
&= |A|^2\frac{\hbar^2 b}{m}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dxe^{-2bx^2}}_{=\sqrt{\frac{\pi}{2b}}} + |A|^2(-\frac{2\hbar^2b^2}{m}+\frac{m\omega^2}{2})\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dxx^2e^{-2bx^2}}_{I_2}. \qquad (3.897)
\end{aligned}$$

Треба израчунати интеграл I_2,

$$\begin{aligned}
I_2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^2 e^{-2bx^2} = 2\underbrace{\int_0^{\infty} dx\, x^2e^{-2bx^2}}_{\text{Смена } t=2bx^2} = \frac{1}{(2b)^{\frac{3}{2}}}\int_0^{\infty} dte^{-t}t^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{(2b)^{\frac{3}{2}}}\Gamma(\frac{3}{2}) \\
&= \frac{\sqrt{\pi}}{2(2b)^{\frac{3}{2}}}. \qquad (3.898)
\end{aligned}$$

Сада знамо како изгледа функционал енергије,

$$E_b(x) = \frac{|A|^2\left[\frac{\hbar^2 b}{m}\sqrt{\frac{\pi}{2b}}+\frac{\sqrt{\pi}}{2(2b)^{\frac{3}{2}}}(-\frac{2\hbar^2b^2}{m}+\frac{m\omega^2}{2})\right]}{|A|^2\frac{\sqrt{\pi}}{2(2b)^{\frac{3}{2}}}} = \frac{\hbar^2 b}{2m}+\frac{m\omega^2}{8b}, \qquad (3.899)$$

минимализоваћемо га по параметру b,

$$0 = \frac{\partial E_b(x)}{\partial b} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8b^2}, \qquad (3.900)$$

одакле добијамо

$$b = \pm\frac{m\omega}{2\hbar}. \qquad (3.901)$$

Негативну вредност параметра b одбацујемо због дивергенције таласне функције у бесконачности, тако да су минимална енергија и њој одговарајућа таласна функција, редом

$$E_{min}(\frac{m\omega}{2\hbar}) = \frac{\hbar\omega}{2}, \qquad \psi_{min}(x) = e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}. \qquad (3.902)$$

8. Предвиђен за самосталан рад.

9. Хамилтонијан пертурбације у $|\varphi\rangle$ репрезентацији је

$$\hat{H}' = \alpha R^2\cos\varphi\sin\varphi. \qquad (3.903)$$

Како је сваки ниво двоструко дегенерисан, техника којом испитујемо цепање енергетских нивоа је пертурбација дегенерисаног нивоа. Секуларне једначина за произвољан енергетски ниво m

$$\det|\begin{pmatrix} \langle m|\hat{H}'|m\rangle & \langle m|\hat{H}'|-m\rangle \\ \langle -m|\hat{H}'|m\rangle & \langle -m|\hat{H}'|-m\rangle \end{pmatrix} - E_m^{(1)}I_{2\times 2}| = 0. \qquad (3.904)$$

Израчунавањем матричних елемената

$$\begin{aligned}
\langle m|\hat{H}'|m\rangle &= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{-im\varphi}e^{im\varphi}\alpha R^2\cos\varphi\sin\varphi d\varphi = 0,\\
\langle -m|\hat{H}'|-m\rangle &= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{im\varphi}e^{-im\varphi}\alpha R^2\cos\varphi\sin\varphi d\varphi = 0,\\
\langle m|\hat{H}'|-m\rangle &= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{-im\varphi}e^{-im\varphi}\alpha R^2\cos\varphi\sin\varphi d\varphi = -i\frac{\alpha R^2}{4}\delta_{m,1},\\
\langle -m|\hat{H}'|m\rangle &= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{im\varphi}e^{im\varphi}\alpha R^2\cos\varphi\sin\varphi d\varphi = i\frac{\alpha R^2}{4}\delta_{m,1},
\end{aligned} \tag{3.905}$$

секуларна једначина се трансформише у

$$\det\left|\begin{pmatrix} -E_m^{(1)} & -i\frac{\alpha R^2}{4}\delta_{m,1} \\ i\frac{\alpha R^2}{4}\delta_{m,1} & -E_m^{(1)} \end{pmatrix}\right| = 0. \tag{3.906}$$

Решавањем ове једначине добијамо поправке енергије

$$E_m\pm = \pm\frac{\alpha R^2}{4}\delta_{m,1}, \tag{3.907}$$

на основу које закључујемо да су сви енергетски нивои осим $m = 1$ остали непромењени, док се енергетски ниво $E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}$ поцепао на два поднивоа $E_{1+} = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{\alpha R^2}{4}$ и $E_{1-} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\alpha R^2}{4}$.

10. На основу задатка (2.1.2) знамо да су својствене функције и својствене енергије честице у бесконачно дубокој сферно симетричној потенцијалној јами

$$\psi_n(r,\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a}}\frac{\sin\frac{n\pi r}{a}}{r}, \quad E = \frac{\hbar^2}{2m}\Big(\frac{n\pi}{a}\Big)^2. \tag{3.908}$$

Енергија основног стања и њој одговарајућа својствена функција је

$$\psi_1(r,\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a}}\frac{\sin\frac{\pi r}{a}}{r}, \quad E_1^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m}\Big(\frac{\pi}{a}\Big)^2. \tag{3.909}$$

Поправка енергије основног стања у првом реду теорије пертурбације је

$$\begin{aligned}
E_1^{(1)} &= \langle 1|H'|1\rangle = \int_0^a\int_0^{4\pi}\psi_1^* H'\psi_1 r^2 dr d\Omega = \frac{1}{2\pi a}\int_0^a r^2\frac{\sin^2\frac{\pi r}{a}}{r^2}\alpha r\int_0^{4\pi} d\Omega\\
&= \frac{4\pi\alpha}{2\pi a}\int_0^a r\sin^2\frac{\pi r}{a}dr = \frac{2\alpha}{a}\int_0^a r\frac{1-\cos\frac{2\pi}{a}r}{2}dr\\
&= \frac{\alpha}{a}\int_0^a rdr - \frac{\alpha}{a}\int_0^a r\cos\frac{2\pi}{a}rdr\\
&= \frac{\alpha}{a}\Big(\frac{r^2}{2}\Big|_0^a - \underbrace{\frac{a}{2\pi}r\sin\frac{2\pi}{a}r\Big|_0^a}_{=0} + \frac{a}{2\pi}\underbrace{\int_0^a\sin\frac{2\pi}{a}rdr}_{=0}\Big) = \frac{\alpha a}{2}
\end{aligned} \tag{3.910}$$

11. Хамилтонијан крутог ротатора у простору је

$$H = \frac{L^2}{2I} \tag{3.911}$$

, где је I момент инерције, а L^2 квадрат угаоног момента Како је $[H, L^2] = 0$, следи да ова два оператора имају заједнички базис, а то су сферни хармоници. Својствена једначина хамилтонијана нам даје својствене енергије система.

$$HY_\ell^m(\theta,\varphi) = \frac{L^2}{2I}Y_\ell^m = \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2I}Y_\ell^m \tag{3.912}$$

Својствене енергије $E_{\ell,m} = \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2I}$ су $2\ell+1$ пута дегенерисане. Та дегенерација потиче од квантног броја m. Како за дато ℓ имамо $2\ell+1$ вредности m, јасно је зашто је толика дегенерација. Једино за $\ell = 0$ имамо недегенерисану својствену вредност, јер вредност квантног броја m може бити само 0.

На систем делује пертурбација

$$H' = -\boldsymbol{Ed} = -d(E_x \sin\theta\cos\varphi + E_y \sin\theta\sin\varphi + E_z\cos\theta) \tag{3.913}$$

Следеће што ћемо урадити је израчунавање матричних елемената облика

$$\langle \ell', m'|H'|\ell, m\rangle = \int Y_{\ell'}^{m'*}(\theta,\varphi)H'Y_\ell^m(\theta,\varphi)d\Omega \tag{3.914}$$

У математичким приручницима можемо наћи да важе следеће релације за сферне хармонике

$$\begin{aligned}
\sin\theta e^{i\varphi}Y_\ell^m &= a_{\ell,m}Y_{\ell+1}^{m+1} - a_{\ell-1,-m-1}Y_{\ell-1}^{m+1}\\
\sin\theta e^{-i\varphi}Y_\ell^m &= -a_{\ell,-m}Y_{\ell+1}^{m-1} + a_{\ell-1,m-1}Y_{\ell-1}^{m-1}\\
\cos\theta Y_\ell^m &= b_{\ell,m}Y_{\ell+1}^m + b_{\ell-1,m}Y_{\ell-1}^m
\end{aligned} \tag{3.915}$$

Коефицијенти који у претходним једначинама фигуришу су једнаки

$$a_{\ell,m} = \sqrt{\frac{(\ell+1+m)(\ell+m+2)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}}, \quad b_{\ell,m} = \sqrt{\frac{(\ell+1+m)(\ell-m+1)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}} \tag{3.916}$$

Сада можемо да закључимо који су ненулти матрични елементи.

$$\begin{aligned}
\langle \ell+1, m+1|H'|\ell, m\rangle &= -\frac{1}{2}(E_x - iE_y)da_{\ell,m}\\
\langle \ell-1, m+1|H'|\ell, m\rangle &= \frac{1}{2}(E_x - iE_y)da_{\ell+1,-m-1}\\
\langle \ell+1, m-1|H'|\ell, m\rangle &= \frac{1}{2}(E_x + iE_y)da_{\ell,-m}\\
\langle \ell-1, m-1|H'|\ell, m\rangle &= -\frac{1}{2}(E_x + iE_y)da_{\ell-1,m-1}\\
\langle \ell+1, m+1|H'|\ell, m\rangle &= -E_z db_{\ell,m}\\
\langle \ell+1, m+1|H'|\ell, m\rangle &= -E_z db_{\ell-1,m}
\end{aligned} \tag{3.917}$$

Сваки енергетски ниво осим за $\ell = 0$ је дегенерисан, тако да је процедура којом треба наћи поравку енергије птурбација дегенерисаног нивоа. У тој процедури морамо решити секуларну једначину. У тој једначини фигуришу матрични елементи између оних стања која имају исту енергију. Код нас би ти матрични елементи имали облик $\langle \ell, m|H'|\ell, m'\rangle$. Међутим, како смо показали да не постоје ненулти матрични елементи таквог облика, ова процедура нам не би дала поправку енергије. Зато се морамо окренути пертурбацији недегенерисаног нивоа.

У првом реду теорије пертурбације прва поправка енергије (ℓ, m)-тог стања је

$$E^{(1)}_{\ell,m} = \langle \ell, m|H'|\ell, m\rangle = 0 \tag{3.918}$$

јер ненулти матрични елемент тог облика не постоји.

У другом реду теорије пертурбације поправка је

$$E^{(2)}_{\ell,m} = \sum_{\ell',m'} \frac{|\langle \ell', m'|H'|\ell, m\rangle|^2}{E_\ell - E_{\ell'}} \tag{3.919}$$

Ако искористимо горе израчунате матричне елементе добијамо

$$\begin{aligned}
E^{(2)}_{\ell,m} &= \frac{2Id^2}{\hbar^2}\Bigg\{\frac{1}{4}(E_x^2 + E_y^2)\Big\{\frac{a^2_{\ell,m} + a^2_{\ell,-m}}{\ell(\ell+1) - (\ell+1)(\ell+2)} + \frac{a^2_{\ell+1,-m-1} + a^2_{\ell,-m}}{\ell(\ell+1) - (\ell-1)\ell}\Big\} \\
&+ E_z^2\Big\{\frac{b^2_{\ell,m}}{\ell(\ell+1) - (\ell+1)(\ell+2)} + \frac{b^2_{\ell-1,m}}{\ell(\ell+1) - (\ell-1)\ell}\Big\}\Bigg\}
\end{aligned} \tag{3.920}$$

Заменом коефицијената a и b и сређивањем дате једначине добијамо

$$E^{(2)}_{\ell,m} = \frac{Id^2}{2\hbar^2}(2E_z^2 - E_x^2 - E_y^2)\frac{\ell(\ell+1) - 3m^2}{(2\ell+3)(2\ell-1)\ell(\ell+1)} \tag{3.921}$$

Ова формула не важи за $\ell = 0$. У том случају ненулти матрични елементи су

$$\begin{aligned}
\langle 1, 0|H'|0, 0\rangle &= -E_z d b_{0,0} \\
\langle 1, 1|H'|0, 0\rangle &= -\frac{1}{2}(E_x - iE_y) d a_{0,0} \\
\langle 1, -1|H'|0, 0\rangle &= \frac{1}{2}(E_x + iE_y) d a_{0,0}
\end{aligned} \tag{3.922}$$

док су коефицијенти $a_{0,0} = \sqrt{\frac{2}{3}}$ и $b_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{3}}$.

Поправка у првом реду теорије пертурбације је 0, док је у другом реду

$$E^{(2)}_{0,0} = \frac{2I}{\hbar^2}\sum_{m'=1,0,-1} \frac{|\langle 1, m'|H'|0, 0\rangle|^2}{0 - 1(1+1)} = -\frac{Id^2E^2}{3\hbar^2} \tag{3.923}$$

12. Хамилтонијан атома хелијума је

$$H = \underbrace{\frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2}}_{H_0} + \underbrace{\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|}}_{H'} \tag{3.924}$$

збир непертурбованог хамилтонијана који чине кинетичке енергије електрона и интеракције електрона са језгром, док је пертурбација електрон-електрон интеракција. Непертурбовани хамилтонијан се може написати као збир два једночестична хамилтонијана

$$H_0 = \underbrace{\frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1}}_{H_{01}} + \underbrace{\frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_2}}_{H_{02}} = H_{01} + H_{02} \tag{3.925}$$

од којих сваки представља хамилтонијан водонику сличног атома тако да су њ1егове својствене енергије

$$E_{ni} = -\frac{1}{n_i^2}\frac{4e^2}{2a_0} \tag{3.926}$$

Дакле, енергија основног стања и таласна функција непертурбованог хамилтонијана су

$$\begin{aligned} E_0 &= E_{01} + E_{02} = -\frac{2e^2}{a_0} - \frac{2e^2}{a_0} = -\frac{4e^2}{a_0} = -108,8eV, \\ \psi_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) &= \psi_{100}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{100}(\boldsymbol{r}_2) = \frac{8}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2(r_1+r_2)}{a_0}} \end{aligned} \tag{3.927}$$

Поправка енергије основног стања у првом реду теорије пертурбације је

$$E_0^{(1)} = \langle 0|H'|0\rangle = \int\int \psi_{100}^*(\boldsymbol{r}_1)\psi_{100}^*(\boldsymbol{r}_2)\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|}\psi_{100}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{100}(\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \tag{3.928}$$

Пертурбацију можемо написати у базису Лежандрових полинома ако z-осу поставимо у правцу вектора $\boldsymbol{r}_1$

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} = \frac{1}{r_>}\sum_{\ell=0}^{\infty} P_l(\cos\theta_2)(\frac{r_<}{r_>})^\ell \tag{3.929}$$

где је $r_< = min\{r_1, r_2\}$, $r_> = max\{r_1, r_2\}$, тако да је

$$
\begin{aligned}
E_0^{(1)} &= \frac{e^2}{\pi^2}(\frac{2}{a_0})^6 \int_0^\infty r_1^2 dr_1 \underbrace{\int_0^\pi \sin\theta_1 d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1}_{=4\pi} \int_0^\infty r_2^2 dr_2 \underbrace{\int_0^\pi \sin\theta_2 d\theta_2}_{\text{смена } u=\cos\theta_2} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi_2}_{=2\pi} \\
& e^{-\frac{4(r_1+r_2)}{a_0}} \frac{1}{r_>} \sum_{\ell=0}^\infty P_l(\cos\theta_2)(\frac{r_<}{r_>})^\ell \\
&= \frac{e^2\, 2^9}{a_0^6} \int_0^\infty r_1^2 dr_1 e^{-4\frac{r_1}{a_0}} \Big[\int_0^{r_1} r_2^2 dr_2 e^{-4\frac{r_2}{a_0}} \sum_{\ell=0}^\infty \frac{1}{r_1}(\frac{r_2}{r_1})^\ell \underbrace{\int_{-1}^1 P_\ell(u) P_0(u) du}_{\frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell,0}} \\
&+ \int_{r_1}^\infty r_2^2 dr_2 e^{-4\frac{r_2}{a_0}} \sum_{\ell=0}^\infty \frac{1}{r_2}(\frac{r_1}{r_2})^\ell \underbrace{\int_{-1}^1 P_\ell(u) P_0(u) du}_{\frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell,0}} \Big] \\
&= \frac{e^2\, 2^{10}}{a_0^6} \int_0^\infty r_1^2 dr_1 e^{-4\frac{r_1}{a_0}} \Big[\frac{1}{r_1} \underbrace{\int_0^{r_1} r_2^2 dr_2 e^{-4\frac{r_2}{a_0}}}_{=I_1} + \underbrace{\int_{r_1}^\infty r_2 dr_2 e^{-4\frac{r_2}{a_0}}}_{=I_2} \Big]
\end{aligned} \tag{3.930}
$$

Интеграли I_1 и I_2 су једнаки, редом:

$$
\begin{aligned}
I_1 &= -\frac{a_0}{4} e^{-\frac{4}{a_0} r_1} (r_1^2 + \frac{a_0}{2} r_1 + \frac{a_0^2}{8}) + \frac{a_0^3}{32} \\
I_2 &= \frac{a_0}{4} e^{-\frac{4}{a_0} r_1} (r_1 + \frac{a_0}{4})
\end{aligned} \tag{3.931}
$$

тако да сада добијамо

$$
\begin{aligned}
E_0^{(1)} &= \frac{e^2\, 2^{10}}{a_0^6} \Big[\int_0^\infty r_1 dr_1 e^{-4\frac{r_1}{a_0}} \Big(-\frac{a_0}{4} e^{-\frac{4}{a_0} r_1} (r_1^2 + \frac{a_0}{2} r_1 + \frac{a_0^2}{8}) + \frac{a_0^3}{32} \Big) \\
&+ \int_0^\infty r_1^2 dr_1 e^{-4\frac{r_1}{a_0}} \frac{a_0}{4} e^{-\frac{4}{a_0} r_1} (r_1 + \frac{a_0}{4}) \Big] \\
&= \frac{e^2\, 2^{10}}{a_0^6} \Big[-\frac{a_0}{4} \int_0^\infty r_1^3 e^{-\frac{8}{a_0} r_1} dr_1 - \frac{a_0^2}{8} \int_0^\infty r_1^2 e^{-\frac{8}{a_0} r_1} dr_1 - \frac{a_0^3}{32} \int_0^\infty r_1 e^{-\frac{8}{a_0} r_1} dr_1 \\
&+ \frac{a_0^3}{32} \int_0^\infty r_1 e^{-\frac{4}{a_0} r_1} dr_1 + \frac{a_0}{4} \int_0^\infty r_1^3 e^{-\frac{4}{a_0} r_1} dr_1 + \frac{a_0^2}{16} \int_0^\infty r_1^2 e^{-\frac{4}{a_0} r_1} dr_1 \Big]
\end{aligned} \tag{3.932}
$$

Сви тражени интеграли су типа

$$
\int_0^\infty r_1^n e^{-\alpha r_1} dr_1 = (\frac{1}{\alpha})^{n+1} \Gamma(n+1) = n!(\frac{1}{\alpha})^{n+1} \tag{3.933}
$$

тако да уз мало рачуна долазимо до израза

$$
E_0^{(1)} = \frac{5}{4} \frac{e^2}{a_0} = 34 eV \tag{3.934}
$$

Енергија основног стања са урачунатом поправком је онда

$$
E_0 + E_0^{(1)} = -108,8 eV + 34 eV = -74,8 eV \tag{3.935}
$$

13. Разматрајмо физички систем са Хамилтонијаном H_0. Својствене вредности и својствене векторе H_0 ћемо означавати са E_n и $|\varphi_n\rangle$

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \tag{3.936}$$

Сматраћемо да је спектар H_0 дискретан и недегенерисан, а добијене формуле се могу лако генерализовати. H_0 није временски зависан, тако да су својствена стања стационарна.

У $t = 0$ применимо пертурбацију на систем. Хамилтонијан онда постаје

$$H(t) = H_0 + H'(t) \tag{3.937}$$

Пертурбација $H'(t)$ је једнака

$$H'(t) = \lambda W(t), \tag{3.938}$$

где је $\lambda < 1$ и $W(t)$ опсервабла, која може бити експлицитно временски зависна и истог је реда величине као и H_0. Ова опсервабла је једнака нули за $t < 0$.

Систем се налазио у почетном стању $|\varphi_i\rangle$, својственом за H_0 и својствене енергије E_i. У $t = 0$, када се пертурбација укључи, систем еволуира: стање $|\varphi_i\rangle$ више није стање у коме се пертурбовани хамилтонијан налази. Ми желимо да израчунамо вероватноћу прелаза P_{if} из стања $|\varphi_i\rangle$ у неко друго својствено стање непертурбованог хамилтонијана H_0, $|\varphi_f\rangle$. другим речима, желимо да испитамо прелазе који се могу индуковати пертурбацијом $H'(t)$ између стационарних стања непертурбованог система.

Између тренутата 0 и t, систем еволуира у складу са Шредингеровом једначином

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = [H_0 + \lambda W(t)]|\psi(t)\rangle \tag{3.939}$$

Решење $|\psi(t)\rangle$ диференцијалне једначине првог реда којој одговара почетни услов

$$|\psi(t = 0)\rangle = |\varphi_i\rangle \tag{3.940}$$

је једнозначно. Тражена вероватноћа прелаза $P_{if}(t)$ се може написати као

$$P_{if}(t) = |\langle\varphi_f|\psi(t)\rangle|^2 \tag{3.941}$$

Цео проблем се своди на налажење $|\psi(t)\rangle$ решења временски зависне Шредингерове једначине, са датим почетним условом. Често ову једначину није могуће експлицитно решити, али када је λ довољно мало, решење $|\psi(t)\rangle$ се може приближно наћи у форми ограниченог развоја у степени ред по параметру λ.

ШРЕДИНГЕРОВА ЈЕДНАЧИНА У $\{|\varphi_n\rangle\}$ РЕПРЕЗЕНТАЦИЈИ

Вероватноћа прелаза $P_{if}(t)$ експлицитно уључује својствена стања $|\varphi_i\rangle$ и $|\varphi_f\rangle$ непертурбованог хамилтонијана H_0. Зато је корисно прећи у $\{|\varphi_n\}$ репрезентацију.

Нека су $c_n(t)$ компоненте кета $|\psi(t)\rangle$ у $\{|\varphi_n\rangle\}$ базису:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\varphi_n\rangle \tag{3.942}$$

где је

$$c_n(t) = \langle\varphi_n|\psi(t)\rangle \tag{3.943}$$

$W_{nk}(t)$ представља матрични елемент опсервабле $W(t)$ у истом базису

$$\langle\varphi_n|W(t)|\varphi_k\rangle = W_{nk}(t) \tag{3.944}$$

H_0 је у овом базису предсттављен дијагоналном матрицом

$$\langle\varphi_n|H_0|\varphi_k\rangle = E_n\delta_{nk} \tag{3.945}$$

Ако у временски зависну Шредингерову једначину уврстимо декомпозицију јединице у форми $\sum_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| = 1$, добијамо

$$i\hbar\frac{d}{dt}\sum_k |\varphi_k\rangle \underbrace{\langle\varphi_k|\psi(t)\rangle}_{c_k(t)} = [H_0 + \lambda W(t)]\sum_k |\varphi_k\rangle\underbrace{\langle\varphi_k|\psi(t)\rangle}_{c_k(t)} \tag{3.946}$$

Ако последњу једначину помножимо бра вектором $\langle\varphi_n|$, добијамо

$$i\hbar\sum_k \frac{dc_k(t)}{dt}\underbrace{\langle\varphi_n|\varphi_k\rangle}_{\delta_{n,k}} = \sum_k E_k c_k(t)\underbrace{\langle\varphi_n|\varphi_k\rangle}_{\delta_{n,k}} + \sum_k \lambda c_k(t)\underbrace{\langle\varphi_n|W(t)|\varphi_k\rangle}_{W_{nk}} \tag{3.947}$$

и на крају

$$i\hbar\frac{dc_n(t)}{dt} = E_n c_n(t) + \sum_k \lambda W_{nk}(t)c_k(t) \tag{3.948}$$

Ако је $W(t) = 0$, коефицијенти нису међусобно повезани и последња једначина постаје

$$i\hbar\frac{dc_n(t)}{dt} = E_n c_n(t) \tag{3.949}$$

на основу које налазимо коефицијент $c_n(t)$

$$c_n(t) = b_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{3.950}$$

, где је b_n константа која зависи од почетних услова.

Ово решење одговара еволуцији непертурбованог хамилтонијана, што смо и морали добити, јер смо ставили $W = 0$.

Ако је $\lambda W(t)$ ненулто, али много мање од H_0, за $\lambda \ll 1$, очекујемо да су решења једначине (3.948) доста блиска решењима једначине (3.950). Другим речима, правимо смену

$$c_n(t) = b_n(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{3.951}$$

Функција $b_n(t)$ се споро мења са временом. Заменом овог коефицијента у (3.948) имамо

$$i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\frac{d}{dt}b_n(t)+E_n b_n(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}=E_n b_n(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}+\sum_k \lambda W_{nk}(t)b_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} \quad (3.952)$$

Ако помножимо обе стране са $e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}$ и уведемо Борову угаону фреквенцију

$$\omega_{nk}=\frac{E_n-E_k}{\hbar} \quad (3.953)$$

која повезује стања E_n и E_k добијамо

$$i\hbar\frac{d}{dt}b_n(t)=\lambda\sum_k e^{i\omega_{nk}t}W_{nk}(t)b_k(t) \quad (3.954)$$

Систем једначина (3.954) је строго еквивалентан Шредингеровој једначини. У највећем броју случајева, не можемо наћи тачно решење. Зато ћемо користити чињеницу да је λ много мање од 1 и покушаћемо да одредимо ово решење у форми степеног развоја по λ

$$b_n(t)=b_n^{(0)}(t)+\lambda b_n^{(1)}(t)+\lambda^2 b_n^{(2)}(t)+... \quad (3.955)$$

Ако овај развој заменимо у (3.954), добијамо

$$i\hbar\frac{d}{dt}\sum_{r=0}^{\infty}b_n^{(r)}\lambda^r=\lambda\sum_k W_{nk}(t)e^{i\omega_{nk}t}\sum_r b_k^{(r)}(t)\lambda^r \quad (3.956)$$

Ако изједначимо коефицијенте уз λ^r са обе стране, добијамо

$$i\hbar\frac{d}{dt}b_n^{(0)}(t)=0, \quad \text{за } r=0 \quad (3.957)$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}b_n^{(r)}(t)=\sum_k e^{i\omega_{nk}t}W_{nk}(t)b_k^{(r-1)}, \quad \text{за } r\geq 1 \quad (3.958)$$

Решење нултог реда је детерминисано једначином (3.957) и почетним условима, док нам рекурентна релација (3.958) омогућава да добијемо решење у првом реду. Знајући решење у првом реду можемо да добијемо решење у другом реду...

У $t<0$, претпоставили смо да се систем налазио у стању $|\varphi_i$. Сви коефицијенти $b_n(t)$, осим $b_i(t)$ онда морају бити нула (и независни од времена, јер је $\lambda W(t)=0$).

У $t=0$, $\lambda W(t)$ трпи скок од 0 до $\lambda W(0)$. Ипак, како је скок коначан, решења Шредингерове једначине су непрекидна у $t=0$. Одавде следи

$$b_n(t=0)=\delta_{ni} \quad (3.959)$$

Коефицијенти развоја једначине (3.955), задовољавају

$$\begin{aligned} b_n^{(0)}(t=0) &= \delta_{ni} && (3.960)\\ b_n^{(r)}(t=0) &= 0 && (3.961) \end{aligned}$$

Из једначине (3.957) следи да је

$$b_n^{(0)}(t) = \delta_{ni} \tag{3.962}$$

Једначину (3.958) за $r = 1$ сада можемо да напишемо у форми

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(1)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} W_{nk}(t)\delta_{k,i} = e^{i\omega_{ni}t} W_{ni}(t) \tag{3.963}$$

Интеграцијом последње једначине добијамо

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} W_{ni}(t')dt' \tag{3.964}$$

У апроксимацији првог реда коефицијент $c_n(t)$ је

$$c_n(t) = (\delta_{ni} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} W_{ni}(t')dt')e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{3.965}$$

док је вектор стања у тренутку t једнак

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_n (\delta_{ni} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} W_{ni}(t')dt')e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |\varphi_n\rangle \\ &= |\varphi_i\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t} + \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_n [(\int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} W_{ni}(t')dt')e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |\varphi_n\rangle] && (3.966) \end{aligned}$$

Вероватноћа прелаза је онда

$$\begin{aligned} P_{if}(t) &= |\langle \varphi_f | \psi(t)\rangle|^2 \\ &= \Big| \underbrace{\langle \varphi_f | \varphi_i \rangle}_{\delta_{i,f}\,=\,0} e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t} + \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_n [(\int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} W_{ni}(t')dt')e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \underbrace{\langle \varphi_f | \varphi_n \rangle}_{\delta_{n,f}}] \Big|^2 \\ &= \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \Big| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} W_{fi}(t')dt' \Big|^2 = \lambda^2 |b_f^{(1)}(t)|^2 && (3.967) \end{aligned}$$

14. Претпоставили смо да $W(t)$ има једну од две просте форме

$$\begin{aligned} W(t) &= W \sin \omega t \\ W(t) &= W \cos \omega t && (3.968) \end{aligned}$$

где је W временски независна опсервабла.

За пертурбацију која осцилује по синусном закону, матрични елементи $W_{fi}(t)$ су

$$W_{fi}(t) = W_{fi}\sin\omega t = \frac{W_{fi}}{2i}(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) \tag{3.969}$$

W_{fi} је временски независан комплексан број. Коефицијент $b_n^{(1)}(t)$ је једнак

$$b_n^{(1)}(t) = -\frac{W_{ni}}{2\hbar}\int_0^{(t)}(e^{i(\omega_{ni}+\omega)t'} - e^{-i(\omega_{ni}-\omega)t'})dt' = \frac{W_{ni}}{2i\hbar}[\frac{1-e^{i(\omega_{ni}+\omega)t}}{\omega_{ni}+\omega} - \frac{1-e^{i(\omega_{ni}-\omega)t}}{\omega_{ni}-\omega}] \tag{3.970}$$

Сада можемо да израчунамо вероватноћу прелаза

$$P_{if,\sin}(t,\omega) = \lambda^2|b_f^{(1)}|^2 = \frac{\lambda^2|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\Big|\frac{1-e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi}+\omega} - \frac{1-e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi}-\omega}\Big|^2 \tag{3.971}$$

Ако разматрамо косинусну пертурбацију, аналогно израчунавање нас доводи до

$$P_{if,\cos}(t,\omega) = \lambda^2|b_f^{(1)}|^2 = \frac{\lambda^2|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\Big|\frac{1-e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi}+\omega} + \frac{1-e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi}-\omega}\Big|^2 \tag{3.972}$$

Пертурбација $\lambda W\cos\omega t$ постаје временски независна за $\omega = 0$. Тада је вероватноћа прелаза изазвана константном пертурбацијом једнака

$$P_{if}(t) = \frac{\lambda^2|W_{fi}|}{\hbar^2}|1-e^{i\omega_{fi}t}|^2 = \frac{\lambda^2|W_{fi}|^2}{\hbar^2}\Big[\frac{\sin\frac{\omega_{fi}}{2}t}{\frac{\omega_{fi}}{2}}\Big]^2 \tag{3.973}$$

15. Вероватноће прелаза изазване косунусном и синусном пертурбацијом из претходног задатка у свом модулу имају да комплексна терма

$$A_+ = \frac{1-e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi}+\omega} = -ie^{i(\omega_{fi}+\omega)\frac{t}{2}}\frac{\sin[(\omega_{fi}+\omega)t/2]}{(\omega_{fi}+\omega)/2} \tag{3.974}$$

$$A_- = \frac{1-e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi}-\omega} = -ie^{i(\omega_{fi}-\omega)\frac{t}{2}}\frac{\sin[(\omega_{fi}-\omega)t/2]}{(\omega_{fi}-\omega)/2} \tag{3.975}$$

Именилац терма A_- је једнак нули за $\omega = \omega_{fi}$(апсорпција кванта енергије $\hbar\omega$), док је именила A_+ терма једнак нули за $\omega = -\omega_{if}$(емисија кванта енергије $\hbar\omega$). Када је ω доста близу ω_{fi}, очекујемо да само терм A_- буде значајан. Зато се он зове 'резонантни' терм, док је A_+ терм 'антирезонантни'(A_+ постаје резонантан за $\omega_{fi} < 0$ и ω близу $-\omega_{fi}$).

Разматраћемо случај за који важи $|\omega - \omega_{fi}| \ll |\omega_{fi}|$, и занемарити антирезонантни терм A_+. Добијамо

$$P_{if}(t,\omega) = \frac{\lambda^2|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\Big[\frac{\sin\frac{(\omega_{fi}-\omega)}{2}t}{\frac{(\omega_{fi}-\omega)}{2}}\Big]^2 \tag{3.976}$$

Ако нацртамо $P_{if}(t,\omega)$ у зависности од ω видећемо резонантну природу вероватноће прелаза. Ова вероватноћа прелаза има свој максимум у $\omega = \omega_{fi}$ који износи $\lambda^2|W_{fi}|^2t^2/4\hbar^2$. Када се померамо од ω_{fi}, вредност ове функције се брзо смањује и постаје једнака нули за $|\omega_{fi}-\omega| = 2\pi/t$. Ако и даље повећавамо вредност разлику $|\omega_{fi}-\omega|$, вероватноћа прелаза осцилује између вредности $\frac{\lambda^2|W_{fi}|^2}{\hbar^2(\omega-\omega_{fi})^2}$ и 0.

Резонантна ширина $\Delta\omega$ се може апроксимативно дефинисати као растојање између прве две нуле $P_{if}(t,\omega)$ око $\omega = \omega_{fi}$. Унутар овог интервала вероватноћа прелаза узима своје највеће вредности.[44]

$$\Delta\omega = \frac{4\pi}{t} \tag{3.977}$$

Све што је време веће то је резонантна ширина мања.

Користећи претпоставку $\omega \approx \omega_{fi}$ занемарили смо терм A_+. Сада ћемо упоредити модуле $|A_+|$ и $|A_-|$. Како је $|A_+(\omega)|^2 = |A_-(\omega)|^2$, $|A_+(\omega)|^2$ може да се добије цртајући криву која је симетрична кривој $|A_-(\omega)|^2$ у односу на осу $\omega = 0$. Ако су ове две криве центриране у тачкама чија је разлика много већа од $\Delta\omega$, јасно је да у околини $\omega = \omega_{fi}$, модуо A_+ је занемарљив у поређењу са модулом A_-. Дакле, резонантна апроксимација је оправдана [45] ако је задовољен услов

$$2|\omega_{fi}| \gg \Delta\omega \tag{3.978}$$

Како је $\Delta\omega$ обрнуто пропорционално времену t, претходни услов добија облик

$$t \gg \frac{1}{|\omega_{fi}|} \simeq \frac{1}{\omega} \tag{3.979}$$

Резултат који смо добили је валидан само за пертурбације које осцилују у времену t које је велико у поређењу са $\frac{1}{\omega}$. Физичко значење је јасно: за време интервала $[0,t]$, пертурбација мора да изведе бројне осцилације. Ако је, са друге стране, t мало у поређењу са $\frac{1}{\omega}$, пертурбација нема времена да осцилује и биће еквивалентна пертурбацији која је линеарна са временом (У случају синусне зависности) или константна (у случају косинусне зависности).

16. Упоређиванем једначина (3.954) и (3.963) можемо видети да једначину (3.963) добијамо тако што у (3.954) заменимо коефицијенте $b_k(t)$ њиховим вредностима $b_k(0)$ у $t = 0$. Кад год је t мало $b_k(0)$ се не разликује превише од $b_k(t)$ и апроксимација остаје валидна.

    Ово се може лепо видети из израза (3.976) који се на резонанци може написати као
$$P_{if}(t,\omega=\omega_{fi}) = \frac{\lambda^2|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}t^2 \tag{3.980}$$

    Ова функција постаје бесконачна за $t = \infty$, што је бесмислено, јер вероватноћа никада не може имати вредност већу од 1.

[44]Први следећи максимум P_{if} се добија у тачки $\frac{(\omega-\omega_{fi})t}{2} = \frac{3\pi}{2}$ је једнак $\lambda^2|W_{fi}|^2t^2/9\hbar^2$

[45]Ако овај услов није задовољен, резонантни и антирезонантни терм интерферирају и добијамо погрешно решење ако просто саберемо $|A_+|^2$ и $|A_-|^2$

У пракси, да би апроксимација првог реда била оправдана, вероватноћа прелаза на резонанцији мора бити много мања од 1, тј

$$t \ll \frac{\hbar}{\lambda |W_{fi}|} \tag{3.981}$$

[46]

17. Ако енергија E_f припада континуалном делу спектра H_0, не можемо мерити вероватноћу налажења система у добро дефинисаном стању $|\varphi_f\rangle$ у времену t. У овом случају је $|\langle|\varphi_f|\psi(t)\rangle|^2$ вероватноћа густине. Физичке предикције за дато мерење укључују интеграцију ове густине вероватноће по одређеној групи финалних стања.

Разматрамо проблем расејања честице масе m у потенцијалу $W(\boldsymbol{r})$. Стања $|\psi(t)\rangle$ честице у времену t могу се развити преко стања $|\boldsymbol{p}\rangle$ са добро дефинисаним импулсом $\boldsymbol{p}$ и енергијом $E = \boldsymbol{p}^2/2m$. Одговарајуће таласне функције у координатној репрезентацији су равни таласи

$$\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}\rangle = (\frac{1}{2\pi\hbar})^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}} \tag{3.982}$$

Густина вероватноће додељена мерењу импулса је $|\langle \boldsymbol{p}|\psi(t)\rangle|^2$.

Детектор који се користи у експериментима у којима се мери импулс даје сигнал кад год је честица расејана са импулсом $\boldsymbol{p}_f$. Овај детектор увек има коначну грешку мерења угла расејања, тако да енергетска селективност није савршена: он емитује сигнал кад год је импулс честице $\boldsymbol{p}$ унутар угла $\delta\Omega_f$ око $\boldsymbol{p}_f$ и његова енергија је укључена у интервалу δE_f центрираном око $E_f = \boldsymbol{p}_f^2/2m$. Ако D_f представља домен $\boldsymbol{p}$- простора дефинисаног овим условима, вероватноћа добијања сигнала из детектора је

$$\delta P_{\boldsymbol{p}_f,t} = \int_{\boldsymbol{p}\in D_f} d^3p |\langle \boldsymbol{p}|\psi(t)\rangle|^2 \tag{3.983}$$

Направићемо смену варијабли која резултује у интеграцији по енергији. Како је

$$d^3p = p^2 dp d\Omega \tag{3.984}$$

заменом варијабле p енергијом E добијамо

$$d^3p = \rho(E) dE d\Omega \tag{3.985}$$

[46] Да би ова теорија имала смисла, очигледно је да услови (3.979) и (3.981) буду компатибилни. Дакле, мора важити

$$\frac{1}{|\omega_{fi}|} \ll \frac{\hbar}{\lambda |W_{fi}(t)|}$$

тј. разлика енергија $|E_f - E_i| = \hbar|\omega_{fi}|$ мора бити много већа од матричног елемента $W(t)$ између стања $|\varphi_i\rangle$ и $|\varphi_f\rangle$

Функција $\rho(E)$ се зове густина финалних стања и може се записати као

$$\rho(E) = p^2 \frac{dp}{dE} = m\sqrt{2mE} \tag{3.986}$$

На основу овога добијамо

$$\delta P(\boldsymbol{p}_f, t) \int_{\Omega \in \delta\Omega_f, E \in \delta E_f} d\Omega dE \rho(E) |\langle \boldsymbol{p}|\psi(t)\rangle|^2 \tag{3.987}$$

ГЕНЕРАЛНИ СЛУЧАЈ

Нека су својствена стања H_0, индексирана континуалним скупом α, тако да се релација ортонормираности може написати у облику

$$\langle \alpha|\alpha'\rangle = \delta(\alpha - \alpha') \tag{3.988}$$

Систем у тренутку t је описан нормализованим кетом $|\psi(t)\rangle$. Желимо да израчунамо вероватноћу $\delta P(\alpha_f, t)$ налажења система у датој групи финалних стања. Карактерисаћемо групу стања доменом D_f вредности параметара α центрираних у α_f, и претпостављамо да су енергије континуалне. Тада је

$$\delta P(\alpha_f, t) = \int_{\alpha \in D_f} d\alpha |\langle \alpha|\psi(t)\rangle|^2 \tag{3.989}$$

Увешћемо густину финалних стања. Уместо означавања ових стања параметром α, користићемо енергију E и скуп осталих параметара β (који су неопходни када H_0 није сам КСКО). Тада $d\alpha$ можемо изразити помоћу dE и $d\beta$

$$d\alpha = \rho(\beta, E) d\beta dE \tag{3.990}$$

Тада је вероватноћа добијања сигнала из детектора

$$\delta P(\alpha_f, t) = \int_{\beta \in \delta\beta_f, E \in \delta E_f} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle \beta, E|\psi(t)\rangle|^2 \tag{3.991}$$

нотацију $|\alpha\rangle$ смо заменили са $|\beta, E\rangle$ да би истакли E и β зависност густине вероватноће $|\langle \alpha|\psi(t)|^2$.

Ако разматрамо систем који се налазио у почетном стању $|\varphi_i\rangle$ које је својствено за H_0. [47]

Заменићемо нотацију $P(\alpha_f)$ са $\delta P(\varphi_i, \alpha_f, t)$ у једначини (3.991) да би нагласили да систем почиње из стања $|\varphi_i\rangle$.

Ако разматрамо константну пертурбацију, прорачун који смо радили у задатку 6 ове области остаје валидан, само што финално стање одговара континуалном спектру H_0. Густина вероватноће у овом случају је

$$|\langle \beta, E|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |\langle \beta, E|W|\varphi_i\rangle|^2 [\frac{\sin \omega_{Ei} t/2}{\omega_{Ei}/2}]^2 \tag{3.992}$$

[47] Стање $|\varphi_i\rangle$ припада дискретном спектру H_0, јер почетна стања система морају бити нормализована на 1.

где је

$$\omega_{Ei} = \frac{E - E_i}{\hbar} \tag{3.993}$$

Сада је

$$\delta P(\varphi_i, \alpha_f, t) = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_{\beta \in \delta\beta_f, E \in \beta E_f} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle \beta, E|W|\varphi_i\rangle|^2 [\frac{\sin \omega_{Ei} t/2}{\omega_{Ei}/2}]^2 \tag{3.994}$$

Функција $[\frac{\sin \omega_{Ei} t/2}{\omega_{Ei}/2}]^2$ има максимум у $E = E_i$ и значајно опада кад год се помернимо од E_i. Зато се ова функција може апроксимирати, до на константу, делта функцијом $\delta(E - E_i)$ јер је

$$\lim_{t\to\infty} [\frac{\sin \omega_{Ei} t/2}{\omega_{Ei}/2}]^2 = \pi t \delta(\frac{E - E_i}{2\hbar}) = 2\pi\hbar t \delta(E - E_i) \tag{3.995}$$

Функција $\rho(\beta, E)|\langle \beta, E|W|\varphi_i\rangle|^2$ варира много спорије са променом енергије E. Претпоставићемо да је E довољно велико да варијација ове функције у енергетском интервалу ширине $4\pi\hbar/t$ центрираном у E_i, буде занемарива.

Како је $\delta\beta_f$ врло мало, интеграција по β није неопходна па је

$$\delta P(\varphi_i, \alpha_f, t) = \delta\beta_f \frac{2\pi}{\hbar} t\, \rho(\beta_f, E_f = E_i) |\langle \beta_f, E_f = E_i|W|\varphi_i\rangle|^2 \tag{3.996}$$

Ако E_i не припада интервалу δE_f вероватноћа је јако мала тако да можемо са довољном тачношћу претпоставити

$$\delta P(\varphi_i, \alpha_f, t) = 0 \tag{3.997}$$

Дакле, за $E_f = E_i$ вероватноћа се повећава линеарно са временом. Вероватноћа прелаза у јединици времена

$$\delta W(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{d}{dt} \delta P(\varphi_i, \alpha_f, t) \tag{3.998}$$

је временски независна.

Ако уведемо густину вероватноће по јединици времена и у јединичном интервалу варијабле β_f долазимо до Фермијевог златног правила

$$\omega(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{\delta W(\varphi_i, \alpha_f)}{\delta \beta_f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \beta_f, E_f = E_i|W|\varphi_i\rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i) \tag{3.999}$$

18. Својствене енергије и својствене функције изотропног 3Д ЛХО су

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}), \qquad |n_x, n_y, n_z\rangle \tag{3.1000}$$

Основно стање је $|0,0,0\rangle$. Матрични елемент вероватноће прелаза у произвољно стање је

$$\begin{aligned}&\langle 0,0,0|qAe^{-t^2/\tau^2}z|n'_x,n'_y,n'_z\rangle\\ &= qAe^{-t^2/\tau^2}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle 000|a_z+a_z^\dagger|n'_x n'_y n'_z\rangle\\ &= qAe^{-t^2/\tau^2}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n'_z+1}\delta_{0,n'_z+1}+\sqrt{n'_z}\delta_{0,n'_z-1})\delta_{0,n'_x}\delta_{0,n'_y}\end{aligned} \tag{3.1001}$$

Једини ненулти матрични елемент је онда

$$\langle 0,0,0|qAe^{-t^2/\tau^2}z|0,0,1\rangle = qAe^{-t^2/\tau^2}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \tag{3.1002}$$

тако да је вероватноћа прелаза сада

$$P_{01}=\frac{1}{\hbar^2}\Big|qA\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\int_{-\infty}^{\infty}dte^{i\omega t}e^{-t^2/\tau^2}\Big|^2=\frac{q^2A^2}{2m\hbar\omega}\Big|\int_{-\infty}^{\infty}dte^{i\omega t}e^{-t^2/\tau^2}\Big|^2 \tag{3.1003}$$

Како је

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\beta x-\alpha x^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}} \tag{3.1004}$$

ми налазимо да је наш интеграл једнак

$$\int_{-\infty}^{\infty}dte^{i\omega t}e^{-t^2/\tau^2}=\tau\sqrt{\pi}e^{-\frac{\omega^2\tau^2}{4}} \tag{3.1005}$$

и коначно

$$P_{01}=\frac{\pi q^2A^2\tau^2}{2m\hbar\omega}e^{-\frac{\omega^2\tau^2}{2}} \tag{3.1006}$$

Прилог А

Дозвољене формуле на испиту

BCH формула: $e^B A e^{-B} = A + [B, A] + \frac{1}{2!}[B, [B, A]] + \frac{1}{3!}[B, [B, [B, A]]] + ...$
$e^A e^B = e^{A+B+[A,B]/2}$
$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$

ЕВОЛУЦИЈА СТАЊА СИСТЕМА
$\Psi(t=0) = \sum_n a_n \psi_n$
$\Psi(t) = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n$
где су ψ_n својствене функције Хамилтонијана који описује тај систем, а E_n својствене вредности.

ГРАНИЧНИ УСЛОВИ ЗА ТАЛАСНУ ФУНКЦИЈУ
1. Коначан скок потенцијала
$\psi(a-) = \psi(a+)$
$\psi'(a-) = \psi'(a+)$
2. Бесконачан скок потенцијала $V = \alpha\delta(x-a)$
$\psi(a-) = \psi(a+)$
$\psi'(a+) - \psi'(a-) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(a)$

ГУСТИНА СТРУЈЕ ВЕРОВАТНОЋЕ, КОЕФИЦИЈЕНТИ R И T
$\vec{j} = \frac{1}{m} Re(\psi^* \vec{p} \psi)$
$R = \frac{|j_r|}{|j_{in}|}$
$T = \frac{|j_t|}{|j_{in}|}$

ЛИНЕАРНИ ХАРМОНИЈСКИ ОСЦИЛАТОР
$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x + \frac{i}{m\omega}p)$
$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x - \frac{i}{m\omega}p)$
$[a, a^\dagger] = 1$
$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$
$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$

УГАОНИ МОМЕНТ
$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$
$L^2|l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l,m\rangle$
$L_z|l,m\rangle = m\hbar|l,m\rangle$
$L_\pm|l,m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}|l,m\pm1\rangle$
$L_\pm = \pm e^{\pm i\varphi}\hbar(\partial\theta \pm ictg\theta\partial\varphi)$
Паулијеве матрице $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

СЛИКЕ
У Шредингеровој слици се вектори стања мењају са временом а опсервабле су константне: $A_S(t) = A_S(t_0)$,
$|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$.
У Хајзенберговој слици вектори стања су константе а опсервабле се мењају са временом $A_H(t) = U(t,t_0)A_S U^\dagger(t,t_0)$, $|\psi\rangle_H = |\psi(t_0)\rangle_S$.

ПЕРТУРБАЦИЈА НЕДЕГЕНЕРИСАНОГ НИВОА
Прва поправка енергије
$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|H'|n^{(0)}\rangle$
Друга поправка енергије
$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{|\langle m^{(0)}|H'|n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$

ПЕРТУРБАЦИЈА ДЕГЕНЕРИСАНОГ НИВОА
потребно је решити секуларну једначину
$$0 = \begin{vmatrix} H'_{11}-E' & H'_{12} & ... & H'_{1n} \\ H'_{21} & H'_{22}-E' & ... & H'_{2n} \\ ... & & & ... \\ H'_{n1} & H'_{n2} & ... & H'_{nn}-E' \end{vmatrix}$$
где је E' поправка енергије, док су H'_{mn} су матрични елементи оператора H' у неком базису који разапиње n - димензиони потпростор.

ВАРИЈАЦИОНИ РАЧУН
$E(\alpha) = \frac{\langle\psi_\alpha|H|\psi_\alpha\rangle}{\langle\psi_\alpha|\psi_\alpha\rangle}$
енергију налазимо варирањем овог функционала по параметру α, $\frac{\partial E(\alpha)}{\partial\alpha} = 0$
ЕМ ПОЉЕ
$H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}+q\boldsymbol{A})^2 + q\varphi$,
$\boldsymbol{B} = rot\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{E} = -\nabla\varphi$.

ЦЕНТРАЛНИ ПОТЕНЦИЈАЛ
$H = T + V(r)$,
$T = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{\boldsymbol{L}^2}{\hbar^2 r^2})$,
$\psi = \psi(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$,
$\psi(r) = \frac{\chi(r)}{r}$.

СЛАГАЊЕ УГАОНИХ МОМЕНАТА
$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}_1 + \boldsymbol{L}_2$,
$V^{l_1} \otimes V^{l_2} = \oplus \sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} V^l$.

ВРЕМЕНСКИ ЗАВИСНА ПЕРТУРБАЦИЈА
$H = H_0 + \lambda W(t)$,
$\psi(t) = \sum_n c_n(t)\psi_n$, где je $H_0\psi_n = E_n\psi_n$,
$\mathrm{i}\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = E_n c_n(t) + \lambda \sum_k W_{nk}(t) c_k(t)$,
$c_n(t) = b_n(t) e^{-\mathrm{i}/\hbar E_n t}$.
$+$ почетни услови.

Прилог Б

Квази дегенерисана теорија пертурбације

Квази дегенерисана теорија пертурбације је генералан и моћан метод за апроксимативну дијагонализацију временски независног Хамилтонијана H. Посебно је погодна за пертурбативну дијагонализацију $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ Хамилтонијана са више трака, али се може користити и у другим проблемима у квантној механици. Квази дегенерисана теорија пертурбације је блиско повезана са конвенционалном стационарном теоријом пертурбације, али је овај метод моћнији зато што не морамо да разликујемо недегенерисану и дегенерисану теорију пертурбације. Како овај метод није превише познат у квантној механици, у овом додатку ћемо детаљно описати његову процедуру.

Хамилтонијан H је изражен као сума два дела: Хамилтонијана H^0 чије својствене енергије E_n и својствене вредности $|\psi_n\rangle$ познајемо, и H', који можемо да третирамо као пертурбацију

$$H = H^0 + H'. \tag{Б.1}$$

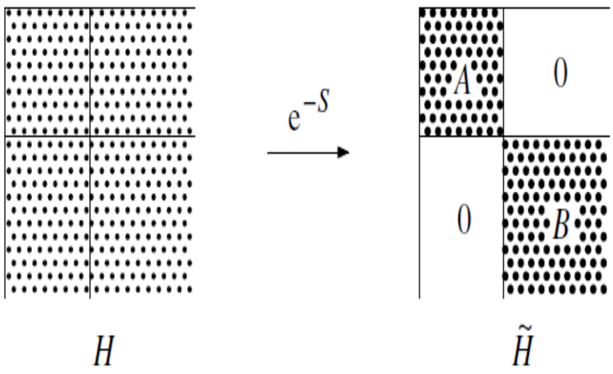
Претпоставићемо да можемо да поделимо скуп својствених стања $\{|\psi_n\rangle\}$ у два слабо интерагујућа подскупа A и B тако да смо само заинтересовани за скуп A али не и за B. Квази дегенерисана теорија пертурбације је заснована на идеји да можемо да конструишемо унитаран оператор e^{-S}, такав да за трансформисани Хамилтонијан

$$\tilde{H} = e^{-S} H e^{S}, \tag{Б.2}$$

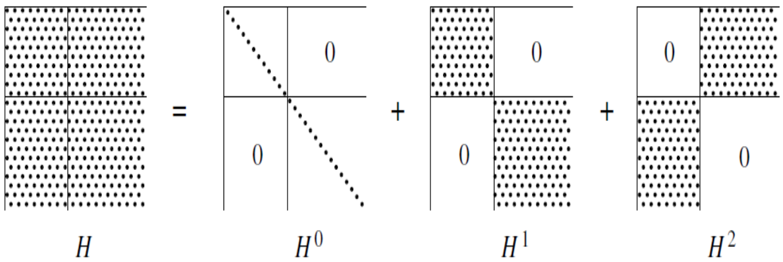
матрични елементи $\langle\psi_m|\tilde{H}|\psi_l\rangle$ између стања $|\psi_m\rangle$ из скупа A и стања $|\psi_l\rangle$ из скупа B нестају до произвољног реда по H'. Процедура уклањања недијагоналних матричних елемената H иде на следећи начин (Слике 1 и 2): прво ћемо Хамилтонијан H написати као суму три оператора

$$H = H^0 + H' = H^0 + H^1 + H^2. \tag{Б.3}$$

Матрични елементи H^1 су ненулти само унутар својствених стања скупа A и својствених стања скупа B, док су матрични елементи H^2 ненулти само између стања скупа A и скупа B. Очигледно, морамо конструисати S тако да трансформација конвертује H^2 у дијагоналну форму сличну H^1 и оставља блок дијагоналну форму



СЛИКА Б.1: Уклањање вандијагоналних елемената H.



СЛИКА Б.2: Репрезентација H као $H^0 + H^1 + H^2$.

$H^0 + H^1$. Да бисмо одредили S, развићемо функцију e^S у ред,

$$e^S = 1 + S + \frac{S^2}{2!} + \frac{S^3}{3!} + ... \tag{Б.4}$$

Заменом (Б.4) у (Б.2) и уочавањем да оператор S мора бити антихермитски $S^\dagger = -S$, добијамо

$$\tilde{H} = \sum_{j=0}^{\infty}[H, S]^{(j)} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!}[H^0 + H^1, S]^{(j)} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!}[H^2, S]^{(j)}, \tag{Б.5}$$

где су комутатори $[A, B]^{(j)}$ дефинисани као

$$[A, B]^{(j)} = [..., [[A \underbrace{, B], B], ...B]}_{j \text{ пута}}. \tag{Б.6}$$

Како S мора бити недијагоналан као H^2, блок дијагоналан део $\tilde{H}_d$ од $\tilde{H}$ садржи чланове $[H^0 + H^1, S]^{(j)}$ за парно j и $[H^2, S]^{(j)}$ за непарно j:

$$\tilde{H}_d = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(2j)!}[H^0 + H^1, S]^{(2j)} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(2j+1)!}[H^2, S]^{(2j+1)}. \tag{Б.7}$$

Слично, недијагоналан део $\tilde{H}_n$ од $\tilde{H}$ садржи чланове $[H^0 + H^1, S]^{(j)}$ за непарно j и $[H^2, S]^{(j)}$ за парно j:

$$\tilde{H}_n = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(2j+1)!}[H^0 + H^1, S]^{(2j+1)} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(2j)!}[H^2, S]^{(2j)}. \tag{Б.8}$$

Сада је S дефинисан условом да је недијагоналан део Хамилтонијана једнак нули,

$$\tilde{H}_n = 0. \tag{Б.9}$$

Развојем у ред

$$S = S^1 + S^2 + S^3 + ... \tag{Б.10}$$

и коришћењем једначина (Б.8) и (Б.9) добијамо следеће једначине за $S^{(j)}$,

$$\begin{aligned}
[H^0, S^{(1)}] &= -H^2, \qquad (\text{Б.11})\\
[H^0, S^{(2)}] &= -[H^1, S^{(1)}],\\
[H^0, S^{(3)}] &= -[H^1, S^{(2)}] - \frac{1}{3}[[H^2, S^{(1)}], S^{(1)}].
\end{aligned}$$

Решавањем последњег система једначина добијамо

$$\begin{aligned}
S^{(1)}_{ml} &= -\frac{H'_{ml}}{E_m - E_l},\\
S^{(2)}_{ml} &= \frac{1}{E_m - E_l}(\sum_{m'} \frac{H_{mm'}H_{m'l}}{E_{m'} - E_l} - \sum_{l'} \frac{H_{ml'}H_{l'l}}{E_m - E_{l'}}),\\
S^{(3)}_{ml} &= \frac{1}{E_m - E_l}\\
\Big[& -\sum_{m'm''} \frac{H_{mm''}H_{m''m'}H_{m'l}}{(E_{m''} - E_l)(E_{m'} - E_l)} - \sum_{l'l''} \frac{H_{ml'}H_{l'l''}H_{l''l}}{(E_m - E_{l''})(E_m - E_{l'})}\\
+ & \sum_{l'm'} \frac{H_{mm'}H_{m'l'}H_{l'l}}{(E_{m'} - E_l)(E_{m'} - E_{l'})} + \sum_{l'm'} \frac{H_{mm'}H_{m'l'}H_{l'l}}{(E_m - E_{l'})(E_{m'} - E_{l'})}\\
+ & \frac{1}{3}\sum_{l'm'} \frac{H_{ml'}H_{l'm'}H_{m'l}}{(E_{m'} - E_{l'})(E_{m'} - E_l)} + \frac{1}{3}\sum_{l'm'} \frac{H_{ml'}H_{l'm'}H_{m'l}}{(E_m - E_{l'})(E_{m'} - E_{l'})}\\
+ & \frac{2}{3}\sum_{l'm'} \frac{H_{ml'}H_{l'm'}H_{m'l}}{(E_m - E_{l'})(E_{m'} - E_l)}\Big]. \qquad (\text{Б.12})
\end{aligned}$$

Индекси m, m' и m'' одговарају стањима скупа A, док индекси l, l' и l'' одговарају стањима скупа B и

$$H_{ml} = \langle\psi_m|H|\psi_l\rangle. \tag{Б.13}$$

Убацујући (Б.12) у (Б.7), добијамо тражене једначине за $\tilde{H}$

$$\tilde{H} = H^{(0)} + H^{(1)} + H^{(2)} + H^{(3)} + H^{(4)}. \tag{Б.14}$$

Треба нагласити да су све енергије у имениоцу једначина за $H^{(i)}$ разлике енергетских нивоа од којих једна енергија одговара стању из скупа A а друга стању из скупа B. Зато ћемо изабрати ова два скупа тако да су енергетски раздвојени. За разлику од стандардне теорије пертурбације, овај метод можемо да користимо и када су стања скупа A дегенерисана. Једначине остају валидне и када Хамилтонијан H садржи матрицу оператора $H'_{nn'}$ плус неке дијагоналне енергије $E_n\delta_{nn'}$,

$$H_{nn'} = E_n\delta_{nn'} + H'_{nn'}. \tag{Б.15}$$

У овом случају, S је и даље матрица која је дефинисана једначинама (Б.12).

$$
\begin{aligned}
H^{(0)}_{mm'} &= H^{0}_{mm'}\,, \\
H^{(1)}_{mm'} &= H'_{mm'}\,, \\
H^{(2)}_{mm'} &= \frac{1}{2}\sum_{l} H'_{ml}H'_{lm'}\left[\frac{1}{E_m - E_l} + \frac{1}{E_{m'} - E_l}\right], \\
H^{(3)}_{mm'} &= -\frac{1}{2}\sum_{l,\,m''}\left[\frac{H'_{ml}H'_{lm''}H'_{m''m'}}{(E_{m'} - E_l)(E_{m''} - E_l)} + \frac{H'_{mm''}H'_{m''l}H'_{lm'}}{(E_m - E_l)(E_{m''} - E_l)}\right] \\
&\quad + \frac{1}{2}\sum_{l,\,l'} H'_{ml}H'_{ll'}H'_{l'm'}\left[\frac{1}{(E_m - E_l)(E_m - E_{l'})} + \frac{1}{(E_{m'} - E_l)(E_{m'} - E_{l'})}\right], \\
H^{(4)}_{mm'} &= \frac{1}{2}\sum_{l,\,m'',\,m'''}\frac{1}{(E_{m''} - E_l)(E_{m'''} - E_l)}\left[\frac{H'_{mm''}H'_{m''m'''}H'_{m'''l}H'_{lm'}}{E_m - E_l} + \frac{H'_{ml}H'_{lm''}H'_{m''m'''}H'_{m'''m'}}{E_{m'} - E_l}\right] \\
&\quad - \frac{1}{2}\sum_{l,\,l',\,m''}\left[\frac{H'_{ml}H'_{ll'}H'_{l'm''}H'_{m''m'}}{(E_{m'} - E_l)(E_{m''} - E_{l'})}\left(\frac{1}{E_{m''} - E_l} + \frac{1}{E_{m'} - E_{l'}}\right) + \frac{H'_{mm''}H'_{m''l}H'_{ll'}H'_{l'm'}}{(E_m - E_{l'})(E_{m''} - E_l)}\left(\frac{1}{E_{m''} - E_{l'}} + \frac{1}{E_m - E_l}\right)\right] \\
&\quad - \frac{1}{24}\sum_{l,\,l',\,m''} H'_{ml}H'_{lm''}H'_{m''l'}H'_{l'm'}\left[\frac{8}{(E_m - E_l)(E_m - E_{l'})(E_{m''} - E_{l'})} + \frac{8}{(E_{m'} - E_l)(E_{m'} - E_{l'})(E_{m''} - E_l)}\right. \\
&\qquad + \frac{4}{(E_m - E_{l'})(E_{m''} - E_l)}\left(\frac{1}{E_m - E_l} + \frac{1}{E_{m''} - E_{l'}}\right) + \frac{4}{(E_{m'} - E_l)(E_{m''} - E_{l'})}\left(\frac{1}{E_{m'} - E_{l'}} + \frac{1}{E_{m''} - E_l}\right) \\
&\qquad \left. - \frac{1}{(E_{m''} - E_l)(E_{m''} - E_{l'})}\left(\frac{1}{E_m - E_l} + \frac{1}{E_{m'} - E_{l'}}\right) - \frac{3}{(E_m - E_l)(E_{m'} - E_{l'})}\left(\frac{1}{E_{m''} - E_l} + \frac{1}{E_{m''} - E_{l'}}\right)\right] \\
&\quad + \frac{1}{2}\sum_{l,\,l',\,l''} H'_{ml}H'_{ll'}H'_{l'l''}H'_{l''m'}\left[\frac{1}{(E_m - E_l)(E_m - E_{l'})(E_m - E_{l''})} + \frac{1}{(E_{m'} - E_l)(E_{m'} - E_{l'})(E_{m'} - E_{l''})}\right],
\end{aligned}
$$

СЛИКА Б.3: Једначина (Б.14).

Прилог Ц

Еренфестов теорем

Еренфестов теорем повезује временски извод очекиваних вредности оператора координате и импулса и очекивану вредношћу силе $F = -\frac{dV}{dx}$ која делује на честицу у скаларном пољу V

$$m\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \langle p\rangle, \quad \frac{d}{dt}\langle p\rangle = -\langle\frac{\partial V(x)}{\partial x}\rangle. \tag{Ц.1}$$

Еренфестов теорем је специјалан случај генералније релације који важи за било који квантно механички оператор

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle + \langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle, \tag{Ц.2}$$

где је H Хамилтонијан система. Овај теорем је доказао Хајзенберг.

Ц.1 Извођење у Шредингеровој слици

Претпоставимо да се систем налази у квантном стању ψ. Временски извод очекиване вредности оператора A је

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle A\rangle &= \frac{d}{dt}\int \psi^* A\psi \; d^3x \qquad \text{(Ц.3)}\\ &= \int \frac{\partial\psi^*}{\partial t}A\psi \; d^3x + \int \psi^*\frac{\partial A}{\partial t}\psi \; d^3x + \int \psi^* A\frac{\partial\psi}{\partial t} \; d^3x\\ &= \int \frac{\partial\psi^*}{\partial t}A\psi \; d^3x + \langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle + \int \psi^* A\frac{\partial\psi}{\partial t} \; d^3x.\end{aligned}$$

Интеграција се врши у целом простору. Уколико искористимо Шредингерову једначину,

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}H\psi, \tag{Ц.4}$$

и њој конјуговану једначину

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\psi^* H, \tag{Ц.5}$$

добијамо

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int \psi^*(AH - HA)\psi \; d^3x + \langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle + \langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle. \qquad (Ц.6)$$

Ц.1.1 Честица масе m која се креће у потенцијалу

Хамилтонијан честице је

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x,t). \qquad (Ц.7)$$

Уколико применимо Еренфестов теорем на на импулс p, добијамо

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[p,H]\rangle + \langle\frac{\partial p}{\partial t}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[p,V(x,t)]\rangle, \qquad (Ц.8)$$

јер импулс комутира са p^2 и нема временску зависност. Уколико p заменимо са $-i\hbar\frac{d}{dx}$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle p\rangle &= \int \psi^* V(x,t)\frac{d\psi}{dx}\; dx - \int \psi^*\frac{d}{dx}(V(x,t)\psi)\; dx, &(Ц.9)\\
&= \int \psi^* V(x,t)\frac{d\psi}{dx}\; dx - \int \psi^*\frac{dV(x,t)}{dx}\psi\; dx - \int \psi^* V(x,t)\frac{d\psi}{dx}\; dx\\
&= -\int \psi^*\frac{dV(x,t)}{dx}\psi\; dx = -\langle\frac{dV(x,t)}{dx}\rangle = \langle F\rangle.
\end{aligned}$$

За оператор x добијамо

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle x\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle[x,H]\rangle + \langle\frac{\partial x}{\partial t}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[x,\frac{p^2}{2m}]\rangle + 0 &(Ц.10)\\
&= \frac{1}{i\hbar 2m}\langle[x,p^2]\rangle = \frac{1}{i\hbar 2m}2i\hbar\langle p\rangle = \frac{1}{m}\langle p\rangle.
\end{aligned}$$

У претходној једначини смо искористили $[x,p^2] = 2i\hbar p$.

Ц.2 Извођење у Хајзенберговој слици

У Хајзенберговој слици је извођење тривијално (уколико кренемо од Хајзенбергове једначине кретања) и временска зависност прелази са стања на операторе. Хајзенбергова једначина кретања је једнака

$$\frac{d}{dt}A(t) = \frac{\partial A(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[A(t),H]. \qquad (Ц.11)$$

Уколико нас занима средња вредност претходне једначине у стању $|\psi\rangle$ добијамо

$$\langle\psi|\frac{d}{dt}A(t)|\psi\rangle = \langle\psi|\frac{\partial A(t)}{\partial t}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{1}{i\hbar}[A(t),H]|\psi\rangle. \qquad (Ц.12)$$

Можемо извући из првог члана на десној страни $\frac{d}{dt}$ зато што стања не зависе од времена, чиме добијамо Еренфестов теорем по други пут.

Литература

[1] В.М.ГАЛИЦКИЙ, Б.М.КАРНАКОВ, В.И.КОГАН (Наука, Москва 1981) *Задачи по квантовой механике*

[2] Др ИГОР Д. ИВАНОВИЋ, Др МАЈА БУРИЋ (Универзитет, Београд 1996) *Збирка задатака из квантне механике*

[3] *F.CONSTANTINESCY*, *E.MAGYARI* (*PergamonPress*, *Oxford*, 1971) *Problems in Quantum Mechanics*

[4] *CLAUDE COHEN − TANNOUDJI*, *BERNARD DIU*, *FRANCK LALOË* (*Herman*, *Paris*, 1973) *Quantum Mechanics*

[5] ЕДИБ ДОБАРЏИЋ (Скрипта) *Збирка задатака из квантне механике*

[6] СУНЧИЦА ЕЛЕЗОВИЋ-ХАЏИЋ, ВЕСНА ПРОКИЋ (Универзитет, Београд, 1996) *Елементарни задаци из квантне механике*

[7] *Michael Karbach*, *Gerhard Muller* (*arXiv* : *cond* − *mat*/9809162*v*1) *Introduction to the Bethe Anzatz I*

[8] *Tapash Chakraborty* (*Elsevier*, 1999) *Quantum Dots*

[9] *G. Burkard and D. Loss*, *Phys. Rev. Lett* **88**, 047903 (2002).