II. OSNOVE KVANTNE MEHANIKE

33. UVOD U FORMALIZAM KVANTNE MEHANIKE

Osnivači kvantne mehanike E. Šredinger i V. Hajzenberg su definitivno uvideli da su delići mikrosveta fizički objekti sa posebnim osobinama, čije se ponašanje ne može nikako razumeti na osnovu analogija sa makrofizičkim pojavama. Pokušaj opisivanja, na primer, elektrona kao čestice ili talasa, dovodi do nerešivih logičkih problema, jer elektron nije ni klasična mala bilijarska lopta, niti je nešto što liči na zvučne talase u vazduhu, već potpuno različit fizički objekt koji se samo u nekim eksperimentima ponaša slično kao klasičan talas ili klasična čestica. Sve informacije o mikroobjektima se dobijaju procesom merenja. Kada se shvati da se svaki proces merenja svodi u suštini na interakciju sa mikroobjektom (na primer, da bi se elektron mogao registrovati, mora se dovesti u neko fizičko polje koje sa njime interaguje), postaje jasno da svaki akt merenja utiče na stanje mikroobjekta. Više merenja iste osobine nekog mikroobjekta, zbog toga, ne mogu ni u principu dati iste rezultate (u klasičnoj fizici se smatra da se rezultati uzastopnih, sukcesivnih, merenja uzajamno razlikuju usled nesavršenosti merne aparature i malih promena spoljašnjih uslova eksperimenta i da se ovi uticaji u principu mogu proizvoljno smanjiti), te se teorijski može predvideti samo konačna verovatnoća da dati mikroobjekt u eksperimentu ispolji određenu osobinu. Očigledno je da se strog mehanički determinizam, koji na osnovu poznatih početnih uslova $(x, \vec{v})$ i poznatih sila tačno predviđa kretanje objekta, ne može ostvariti u opisu ponašanja mikroobjekata. Shodno idejama De Brolja, kvantna mehanika Šredingera[35] stanje mikroobjekta opisuje talasnom funkcijom ψ i definiše matematičke metode pomoću kojih se mogu izračunati kako talasna funkcija, tako i najverovatniji rezultati eksperimenata vršenih na objektu koji je opisan talasnom funkcijom ψ.

33.1. PRINCIPI KVANTNE MEHANIKE

Kvantna mehanika se zasniva na dva principa i to su *princip superpozicije stanja* i *princip neodređenosti*. Oba principa po svom sadržaju daju nešto kvalitativno novo u odnosu na shvatanja klasične fizike.

a. Princip superpozicije

Princip superpozicije demantuje klasični determinizam u smislu da zadati početni uslovi i sile tačno određuju ponašanje (stanje) klasičnog objekta na svakom mestu i u svakom trenutku vremena. Prema principu superpozicije, maksimalni

[35] U ovom su poglavlju osnove kvantne fizike izložene preko Šredingerovog formalizma. U fizičkoj suštini identičan, ali matematički različit metod V. Hajzenberga ima danas široku primenu u kvantnoj teoriji polja.

domet kvantnomehaničke analize ponašanja mikroobjekta je određivanje verovatnoće da on u aktu merenja bude registrovan u datom stanju.

Princip superpozicije glasi: *ako se čestica* (mikroobjekt) *može naći u kvantnim stanjima* ψ_1 i ψ_2, *ona se tada može naći i u stanju koje opisuje linearna kombinacija stanja* ψ_1 *i* ψ_2, *odnosno u stanju:*

$$\psi = a_1 \psi_1 + a_2 \psi_2 \tag{33.1}$$

Brojevi a_1 i a_2 su u opštem slučaju kompleksni, a kvadrat njihovih modula $|a_1|^2$, odnosno $|a_2|^2$, predstavljaju, redom, verovatnoće da u aktu merenja čestica bude registrovana u stanju ψ_1, odnosno ψ_2.

Bilo bi potrebno na ovom mestu objasniti na koji se način principom superpozicije opisuje odstupanje ponašanja mikroobjekata od zakona klasičnog determinizma.

Posmatrajmo najpre eksperiment sa klasičnim objektom. Ako se puška nanišani ka otvoru na čeličnoj ploči i učvrsti na neki nosač, tada se može, na osnovu ponašanja prvog ispaljenog metka, predvideti i ponašanje svih ostalih kasnije ispaljenih metaka (pod uslovom da je puška potpuno stabilna, te da se njen položaj nakon prvog učvršćenja nije promenio tokom ispaljivanja svih ostalih metaka). Ako prvi metak prođe kroz otvor, prolaze i svi ostali. Ukoliko prvi metak ne prođe (loše nanišanjeno), ne prolazi nijedan od sledećih. Ovo je ponašanje klasičnog objekta, koje je, kao što se vidi, potpuno determinisano početnim uslovima.

Zamislimo sada da se *pod jednakim uslovima* jedan za drugim propuštaju fotoni svetlosnog izvora na kristal turmalina. Poznato je da kristal turmalina propušta fotone koji su polarizovani normalno na njegovu optičku osu, a ne propušta one koji su polarizovani paralelno optičkoj osi. Iza kristala turmalina registruje se prolazak fotona. *Rezultat merenja nije*, kao kod puščanih metaka, determinisan. Prvi bi foton, na primer, prošao, zatim dva ne bi, tada bi jedan prošao itd., iako su svi pušteni pod jednakim uslovima. U skladu sa principom superpozicije, svaki od upadnih fotona se nalazi u stanju opisanom linearnom kombinacijom:

$$\psi = a_1 \psi_{\perp} + a_2 \psi_{\parallel},$$

gde $\psi_{\perp}$ i $\psi_{\parallel}$ označavaju talasne funkcije paralelno i normalno polarizovanih fotona. Pri prolasku kroz kristal turmalina foton interaguje sa atomima i elektronima kristala, oni ga prebacuju iz stanja jedne u stanje druge polarizacije, dok na kraju ne izleti iz kristala, ako je konačan rezultat interakcije normalna polarizacija, ili ostane u kristalu ako je rezultat interakcije paralelna polarizacija. Kvantna mehanika može, nalaženjem $|a_1|^2$ i $|a_2|^2$, da kaže koji je slučaj verovatniji, a nikako ne može da predvidi kada će se šta tačno dogoditi. Ova statistička priroda ponašanja mikroobjekata je posledica njihove interakcije (u posmatranom slučaju, fotona) sa makroskopskom mernom aparaturom (kristal turmalina).

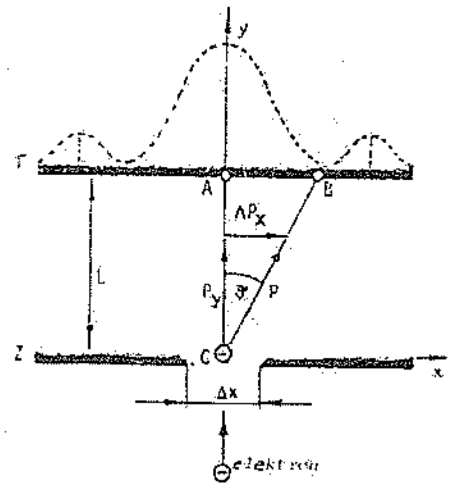
b. Hajzenbergov princip neodređenosti

— **Neodređenost koordinate i impulsa.** U klasičnoj mehanici je za proučavanje kretanja nekog tela potrebno poznavanje položaja toga tela i njegove brzine u određenom trenutku vremena. Smatralo se da se ove veličine istovremeno mogu proizvoljno precizno izmeriti, što je dovoljno da se trajektorija čestice u poznatom polju sile u potpunosti odredi.

Pokazalo se, međutim, da za čestice u mikrosvetu nije istovremeno moguće tačno izmeriti i položaj i impuls. Ako je neodređenost u merenju x-komponente impulsa Δp_x, a neodređenost u merenju koordinate Δx, tada je prema Hajzenbergu:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h \tag{33.2}$$

Relacija (33.2) izražava Hajzenbergov[86] princip neodređenosti za položaj i impuls čestice, koji glasi: *Mikročestica istovremeno ne može imati tačnu vrednost jedne koordinate i komponentu impulsa koja odgovara toj koordinati, pri čemu proizvod neodređenosti tih veličina ne može biti manji od veličine h.* Lako se može pokazati da je princip neodređenosti posledica talasne prirode mikročestica. Zamislimo eksperiment u kojem se želi simultano odrediti i x-koordinata i x-komponenta impulsa p_x elektrona (sl. 33.1). Neka se snop elektrona kreće u pravcu y-ose sa nekim impulsom p_y. Da bi se odredio položaj elektrona u pravcu x-ose, postavlja se zaklon Z sa pukotinom širine Δx. Kada elektron prođe kroz pukotinu i ostavi traga na fluorescentnom ekranu F, tada je njegova koordinata x određena sa tačnošću Δx, jer se ne može utvrditi kroz koju je tačku pukotine elektron prošao. Ako je širina pukotine reda veličine ili manja od De Broljeve talasne dužine elektrona, dolazi do difrakcije elektrona. Sa smanjenjem širine pukotine smanjuje se neodređenost koordinate x, ali se zbog toga širi centralni difrakcioni maksimum, pa pravci kretanja elektrona, a time i njihovi impulsi postaju neodređeni. Većina elektrona, nakon prolaska kroz pukotinu, pada u centralni maksimum difrakcione slike. Nijedan elektron ne pogađa na zaklonu, recimo, tačku B, jer ona predstavlja centar prvog difrakcionog minimuma. Neka je p_B dodatni impuls u pravcu x-ose, koji pri interakciji sa zaklonom dobija elektron koji pogađa ekran malo ulevo od tačke B. Dakle, većina elektrona dobija impulse u domenu između $-p_B$ i p_B. Tada je apsolutna neodređenost impulsa u pravcu x-ose: $\Delta p_x = p_B$. Sa slike se vidi da je:



Sl. 33.1

$$\Delta p_x = p \sin \vartheta = \frac{h}{\lambda} \sin \vartheta,$$

dok je neodređenost položaja:

$$\Delta x = d,$$

pa je proizvod neodređenosti:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{h}{\lambda} d \sin \vartheta \tag{33.3}$$

[86] Werner Heisenberg (1901—1976) nemački fizičar; radio na problemima kvantne mehanike, 1927. god. postavio princip neodređenosti. Godine 1932. dobio je Nobelovu nagradu za fiziku.

Iz teorije difrakcije na pukotini, uslov za pojavu prvog difrakcionog minimuma ima oblik:

$$d \sin \vartheta = \lambda,$$

pa se zamenom ove vrednosti u relaciju (33.3) dobija:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = h = 2\pi\hbar,$$

što je u saglasnosti sa Hajzenbergovom relacijom (33.2) neodređenosti za koordinatu i impuls čestice:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant \hbar.$$

Znači, talasna priroda mikročestica nameće konačnu granicu na tačnost simultanog merenja njihovog položaja i impulsa.

Relacija (33.2) određuje granice primenljivosti zakona klasične mehanike. Nemogućnost istovremenog, tačnog merenja početnih uslova kretanja mikročestica, tj. položaja i brzine, uslovljavaju nemogućnost određivanja putanje (trajektorije) mikročestica. To znači da klasični pojam trajektorije (orbite) nema smisla u slučaju kada se posmatra kretanje mikročestica u atomskim razmerama. Međutim, za slučaj kretanja mikroskopskih tela, proračun izvršen na osnovu relacije neodređenosti (33.2) pokazuje da se neizvesnosti položaja i brzina ovih tela mogu potpuno zanemariti. Ako se relacija (33.2) napiše u obliku:

$$\Delta x \cdot \Delta v_x = \hbar / m \tag{33.4}$$

vidi se da je, s obzirom na malu vrednost kvanta dejstva $\hbar$ u odnosu na mase makroskopskih tela m, odnos $\hbar/m$ vrlo mala veličina, pa se za ovakva tela neizvesnosti koordinate i brzine mogu u potpunosti zanemariti. To znači da se kod tela velikih masa istovremeno mogu meriti položaj i brzina, što je osnovna pretpostavka u klasičnoj mehanici.

Jedna od posledica principa neodređenosti je odsustvo stanja apsolutnog mirovanja. Takvo je stanje, prema klasičnom shvatanju temperature, dostignuto na apsolutnoj nuli. Trebalo bi da na apsolutnoj nuli sve čestice miruju (impuls jednak nuli). Ako bi sve čestice nekog tela mirovale, tj. imale tačno određen impuls, tada bi one, prema principu neodređenosti, imale potpuno neodređen položaj (bile bi raspoređene svuda po beskrajnom prostoru). Praksa pokazuje da se telo na temperaturi bliskoj apsolutnoj nuli nalazi u čvrstom agregatnom stanju i zauzima konačan prostor. Prema tome, impuls njegovih sastavnih delova (atoma, molekula) ne može biti precizno određen, tj. konkretno u ovom slučaju nije jednak nuli, već je reda $\hbar l^{-1}$, gde je l linearna dimenzija tela.

— **Neodređenost energije i vremena.** Osim relacije neodređenosti koja povezuje koordinatu i impuls, konstatovano je da postoji i relacija neodređenosti između energije i vremena:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geqslant \hbar \tag{33.5}$$

gde Δt predstavlja vremenski interval u kojem čestica ima energiju $E \pm \Delta E$.

Treba naglasiti da, kako je vreme u kvantnoj mehanici parametar, a ne operator fizičke veličine, relacija (33.5) nije ugrađena u kvantnomehanički formalizam. Međutim, svi eksperimentalni rezultati pokazuju da nije moguće simultano, proizvoljno tačno odrediti energiju mikroobjekta za proizvoljno kratko vreme. Problem merenja energije mikroobjekta se (s obzirom na relaciju $E = \hbar\omega$) svodi na problem merenja kružne frekvencije. Da bi se odredila kružna frekvencija monohromatskih

oscilacija neophodno je da se izmeri broj kružnih oscilacija n' u vremenskom intervalu Δt:

$$\omega = \frac{n'}{\Delta t} \tag{33.6}$$

S obzirom da se mora odrediti broj celih oscilacija u konačnom vremenu Δt, najmanje se uvek greši za jednu oscilaciju, tj. $\Delta n' \geqslant 1$, odnosno na osnovu relacije (33.6):

$$\Delta\omega = \frac{\Delta n'}{\Delta t} \geqslant \frac{1}{\Delta t} \tag{33.7}$$

kako je $\Delta E = \hbar \Delta\omega$, obrazac (33.7) daje pomenutu relaciju neodređenosti:

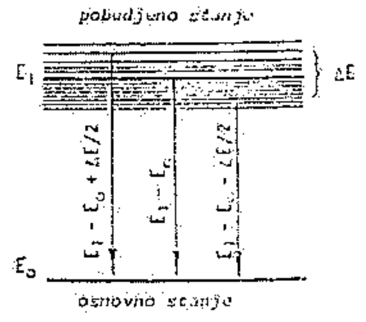
$$\Delta E \cdot \Delta t \geqslant \hbar$$

Iz navedenih primera se vidi da je neodređenost fizičkih veličina, vezanih relacijama neodređenosti, isključiva posledica dualizma, odnosno korpuskularno-talasne prirode čestica.

— **Atom i relacije neodređenosti.** Na osnovu relacije (33.5) se može objasniti zašto se atom ne registruje u međustanju za vreme kvantnog skoka[87]. Naime, za merenje energije elektrona u atomu sa tačnošću većom od $\Delta E = E_i - E_f$ (gde su E_i i E_f energije elektrona u početnom i krajnjem stanju) je potrebno daleko duže vreme od trajanja kvantnog skoka. Pažljiv čitalac može da primeti da se ovim stavom narušava zakon o održanju energije. Tačno je da relacija (33.5) dozvoljava da kvantni sistemi za veoma kratko vreme naruše ovaj zakon. Naime, kvantni sistem može iz početnog stanja E_i da pređe u bilo koje stanje E_f bez ikakve interakcije sa okolinom, ako se u početno stanje vrati za vreme Δt koje zadovoljava uslov: $\Delta t \cdot |E_i - E_f| \geqslant \hbar$. Ovakva stanja E_f kvantnih sistema se nazivaju *virtuelna* (nemerljiva) stanja.

Relacija neodređenosti (33.5) takođe dovodi do izvesne revizije pojma stacionarnih stanja atoma. U osnovnom stanju elektron može da ostane beskrajno dugo, jer ne može da izvrši prelaz na niži nivo. Tada je $\Delta t = \infty$, odnosno $\Delta E = 0$, pa je širina energetskog nivoa osnovnog stanja jednaka nuli. To znači da je energija (osnovnog stanja) E_0 potpuno određena. Međutim, elektron u pobuđenom stanju ostaje veoma kratko vreme. Za svako pobuđeno stanje karakteristično je srednje vreme života τ, ali se atom može deekscitovati kako pre, tako i posle isteka vremena τ. Ovakva neodređenost vremena boravka elektrona na energetskom nivou E_1 uslovljava, na osnovu relacije (33.5), neodređenost u energiji nivoa:

$$\Delta E_1 \geqslant \frac{\hbar}{\tau} \tag{33.8}$$



Sl. 33.2

koja je utoliko veća, ukoliko je srednje vreme života pobuđenog stanja atoma kraće. Pri prelasku elektrona iz pobuđenog stanja E_1 u osnovno stanje E_0 (sl. 33.2), emitovano zračenje ima, umesto jedne diskretne talasne dužine, niz velikog broja vrlo bliskih talasnih dužina. Spektralna linija, prema tome, ima neku konačnu širinu koja se naziva *prirodna širina*.

[87] U ovom jednostavnom pristupu izuzeti su (zanemareni su) višekvantni prelazi između dva kvantna stanja.

Kao što je već rečeno, Hajzenbergova relacija neodređenosti (33.2) negira mogućnost određivanja putanje mikroobjekata. Iz ovog stava direktno sledi da Borova tvrdnja o kruženju elektrona oko jezgra atoma, u okviru kvantne mehanike gubi smisao. Očigledno je da se umesto klasičnog mehaničkog objašnjenja (31.8) stabilnosti atoma mora uvesti kvantnomehaničko tumačenje.

Pomoću relacija neodređenosti (33.2) jednostavno se može objasniti zašto elektron, kao negativno naelektrisanje, usled Kulonove sile, ne padne na pozitivno jezgro i ako ne kruži oko njega. Ako se kaže da se elektron u jednom trenutku kreće na rastojanju r od jezgra, sa impulsom p, proizvod ove dve veličine mora biti najmanje jednak konstanti $\hbar$, tj.

$$pr = \hbar \tag{33.9}$$

jer bi se inače narušio princip neodređenosti (33.2). Ukupna energija (nerelativističkog) elektrona u atomu sa jednim elektronom je zbir njegove kinetičke i potencijalne energije:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{ze^2}{r} \tag{33.10}$$

Ako se r izrazi iz (33.9) i zameni u (33.10), dobija se:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{ze^2 p}{\hbar} \tag{33.11}$$

Atom, kao i svaki mehanički sistem, postaje stabilan kada mu energija dostigne minimalnu vrednost. Minimum funkcije (33.11) određuje se iz uslova:

$$\frac{dE}{dp} = \frac{2p}{2m} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{ze^2}{\hbar} = 0 \tag{33.12}$$

odakle se dobijaju parametri atoma u stanju stabilne ravnoteže:

$$\left.\begin{aligned} p_0 &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{mze^2}{\hbar} = \frac{1}{2\varepsilon_0}\frac{mze^2}{h} && \text{a}\\ r_0 &= \frac{\hbar}{p_0} = 4\pi\varepsilon_0\frac{\hbar^2}{mze^2} = \frac{\varepsilon_0}{\pi}\frac{h^2}{mze^2} && \text{b}\\ E_0 &= -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{mz^2e^4}{2\hbar^2} = -\frac{1}{8\varepsilon_0^2}\frac{mz^2e^4}{h^2} && \text{c}\end{aligned}\right\} \tag{33.13}$$

S obzirom na to da su vrednosti (33.13, b. i c) identične relacijama (31.9) i (31.11), može se zaključiti da relacija neodređenosti kombinovana sa principom minimuma energije u stacionarnom stanju, verno reprodukuje eksperimentalno proverena predviđanja Borovog modela za osobine atoma u osnovnom stanju.

Elektron može da priđe bliže jezgru od prve Borove orbite, samo ako dobije dodatni impuls, odnosno dodatnu energiju, ali na rastojanju $r < r_0$ nije više u vezanom stanju.

Na osnovu izloženog se može zaključiti da se smanjenjem dimenzija složenog kvantnog sistema mora povećati energija veza između delova sistema. Relativno slaba Kulonova sila nije dovoljna za izgradnju kvantnih sistema koji imaju manje dimenzije od dimenzija atoma ($r \simeq 10^{-10}$ m). Međutim znatno jača sila jake interakcije povezuje delove atomskog jezgra (protone i neutrone) u stabilan kvantnomehanički sistem, dimenzija reda veličine 10^{-14} m.

33.2. POSTULATI KVANTNE MEHANIKE

S obzirom na izložene specifičnosti mikrosveta, kvantna fizika opisuje njegove osobine pomoću matematičkog aparata, koji se bitno razlikuje od aparata klasične fizike. Polazeći od osnovne uloge eksperimenta i procesa merenja pri upoznavanju mikrosveta, u osnovi matematičkog aparata kvantne mehanike leže četiri teorijska postulata[88].

a. Postulat o funkciji stanja

Ovim se postulatom definiše matematički objekt kojim se opisuje stanje kvantnomehaničkog sistema: „*Stanje kvantnog sistema se opisuje funkcijom stanja* $\psi(\vec{r}, t)$, *za koju važi princip superpozicije.*" Sve merljive osobine mikroobjekta mogu se izračunati iz njegove funkcije stanja.

Funkcija stanja (talasna funkcija) ulazi u matematički formalizam kvantne mehanike, kao generalizacija De Broljeve ideje o talasima materije. Ispravno tumačenje fizičkog smisla talasne funkcije dao je Maks Born 1926. godine na osnovu pažljive analize nastanka interferencione slike (sl. 33.1). Ako se kvanti (fotoni, elektroni) propuštaju kroz pukotinu jedan po jedan, pri prolasku jednog kvanta trag se javlja samo na jednom mestu na ekranu, dok se na ostalim ne događaju nikakve promene. Znači jedan kvant ne pravi interferencionu sliku, već pri prolasku kroz pukotinu skreće pod određenim uglom čija se vrednost statistički menja od kvanta do kvanta. Kvanti u celini stižu do ekrana i gomilaju se na mestima koja odgovaraju maksimumu verovatnoće skretanja. Difrakciona slika ne nastaje zbog toga što se kvanti „razmazuju" na pukotini, već zato što njihovo skretanje na pukotini ima slučajni karakter. Talasna funkcija, kojom se opisuje kretanje kvanata, a koji u velikom broju izgrađuju interferencionu sliku, očigledno određuje verovatnoću da kvanti udare na određeno mesto na ekranu.

Tačnije rečeno, u opštem slučaju, kvadrat modula talasne funkcije jednak je verovatnoći dP da se čestica nađe unutar zapremine dV:

$$dP = |\psi|^2\, dV \tag{33.14}$$

S obzirom da je talasna funkcija kompleksna funkcija realnih promenljivih $\vec{r}$ i t, uvek može da se izrazi u obliku:

$$\psi(\vec{r}, t) = a + ib = Ae^{i\varphi} \tag{33.15}$$

gde su a, b, A i φ realne funkcije od $\vec{r}$ i t. A je amplituda, a t je faza kompleksne funkcije. Konjugovano kompleksna funkcija ψ^* se definiše relacijom:

$$\psi^*(\vec{r}, t) = a - ib = Ae^{-i\varphi} \tag{33.16}$$

Na osnovu (33.15) i (33.16) se vidi da je proizvod:

$$\psi\psi^* \equiv |\psi|^2 = a^2 + b^2 = A^2 \tag{33.17}$$

jednak kvadratu amplitude talasne funkcije.

---

[88] Često se, već istaknuta činjenica, da se u kvantnoj fizici rezultat merenja svake fizičke veličine tretira kao statistička veličina, naziva „nultim" postulatom kvantne mehanike.

S obzirom da se mikroobjekt sigurno nalazi u nekom delu prostora (čemu odgovara verovatnoća $P=1$) zapreminski integral (33.14) po ukupnom prostoru mora biti jednak jedinici:

$$\int_{V_\infty} dp = \int_{V_\infty} \psi\psi^* \, dV = \int_{V_\infty} A^2 \, dV = 1 \qquad (33.18)$$

Uslov (33.18) naziva se *uslov normiranja.* U kvantnoj mehanici se verovatnoća stanja može izračunati samo iz normiranih funkcija stanja.

Naveden fizički smisao mogu da izraze samo jednoznačne, neprekidne i kvadratno integrabilne funkcije stanja, koje su uvek različite od nule, jer eksperimenti pokazuju da je verovatnoća događaja uvek jednoznačna i neprekidna funkcija vremena i koordinate, a uslov (33.18) mogu da ispune samo kvadratno integrabilne funkcije koje su različite od nule. Pomoću talasne funkcije može samo da se predskaže sa kojom verovatnoćom čestica može da se pronađe u različitim tačkama prostora. Na prvi pogled izgleda da kvantna mehanika daje mnogo manje tačno i iscrpno opisivanje kretanja čestice nego klasična mehanika, koja tačno određuje položaj i brzinu čestice u svakom trenutku vremena. U realnosti, međutim, nije tako. Kvantna mehanika mnogo dublje otkriva stvarno ponašanje mikročestica. Ona ne može da odredi samo ono, što ustvari i ne postoji. Primenjeni na mikročestice pojmovi određenog položaja i trajektorije, kao što je već istaknuto, gube svoj smisao.

b. Postulat o operatorima fizičkih veličina

Za razliku od klasične fizike, gde su osobine fizičkih sistema (energija, impuls, moment impulsa itd.) opisane matematičkim funkcijama koje mogu imati proizvoljne realne brojne vrednosti, u kvantnoj mehanici se svakoj merljivoj fizičkoj osobini kvantnog sistema pridružuje matematički operator. Postulat o operatorima može da se formuliše na sledeći način: *„Svakoj fizičkoj veličini f se pridružuje linearni ermitski operator $\hat{F}$ pri čemu se merenjem vrednosti veličine f dobija uvek jedna od svojstvenih vrednosti operatora $\hat{F}$.“*

Da bi se ovaj postulat razumeo, neophodno je da se upoznaju osnovne osobine kvantnomehaničkih operatora. Operator je simbol za određenu matematičku operaciju koju treba izvesti na nekoj promenljivoj veličini. To su, na primer, operatori sin, $\partial/\partial x$, $\sqrt{\ }$, $(\ )^n$ itd. Kako u opštem slučaju rezultat primene dve matematičke operacije zavisi od redosleda primene tih operacija $\left\{\text{na primer, } \frac{d}{dx}(x^n) \neq \neq \left(\frac{dx}{dx}\right)^n\right\}$, kvantnomehanički operatori u opštem slučaju nisu komutativni:

$$\hat{A}\cdot\hat{B} \neq \hat{B}\cdot\hat{A} \qquad (33.19)$$

Može se pokazati da je data relacija matematička osnova kvantnomehaničkih relacija neodređenosti. Naime, ako operatori $\hat{P}$ i $\hat{Q}$ ne komutiraju, tada se fizičke veličine p i q ne mogu simultano, proizvoljno tačno meriti.

Delujući na kvantnomehaničko stanje ψ operator fizičke veličine $\hat{F}$ mora dati novo kvantnomehaničko stanje φ:[89]

$$\hat{F}\psi = \varphi \qquad (33.20)$$

[89] Kaže se: Operator $\hat{F}$ primenjen na ψ daje neku novu funkciju φ.

Delujući na linearnu kombinaciju stanja, operator fizičke veličine $\hat{F}$ mora da da linearnu kombinaciju novih stanja. U protivnom bio bi narušen princip superpozicije stanja. Znači:

$$\left.\begin{aligned} \hat{F}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) &= a_1\hat{F}\psi_1 + a_2\hat{F}\psi_2 = a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2 \\ \hat{F}\psi_1 = \varphi_1; \quad \hat{F}\psi_2 &= \varphi_2 \end{aligned}\right\} \qquad (33.21)$$

Na osnovu izloženog, ili tačnije da bi princip superpozicije bio zadovoljen, operator fizičke veličine u kvantnoj mehanici mora biti linearan, što se u opštem slučaju zražava uslovom:

$$\hat{F}\sum_n a_n\psi_n = \sum_n a_n\hat{F}\psi_n \qquad (33.22)$$

Pre nego što se pređe na sledeći zahtev koji mora da ispuni operator fizičke veličine u kvantnoj mehanici, zadržimo se na *svojstvenom problemu* operatora. Svojstveni problem operatora $\hat{F}$ jeste jednačina:

$$\hat{F}\psi = F\psi \qquad (33.23)$$

gde je ψ kvantnomehaničko stanje, a F broj koji predstavlja izmerenu vrednost fizičke veličine f u tom stanju. Obično se svojstveni problem raspada na niz jednačina:

$$\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad (33.24)$$

Funkcije ψ_n su *svojstvene funkcije* operatora $\hat{F}$, a brojevi F_n (izmerene vrednost fizičke veličine f) se nazivaju *svojstvene vrednosti.*

Matematički prelaz sa (33.23) na (33.24) ustvari opisuje sam akt merenja. Pre merenja se sistem nalazi u stanju ψ (koje je superpozicija svojstvenih stanja ψ_n) i na njemu se mogu (sa različitim verovatnoćama) izmeriti sve moguće svojstvene vrednosti fizičke veličine f. Aktom merenja se dobija dodatna informacija o sistemu, određuje se jedna od mogućih svojstvenih vrednosti merene veličine f. Često se kaže da merenje fizičke veličine f na sistemu, prevodi sistem u jedno od svojstvenih stanja operatora $\hat{F}$. Kako su brojevi F_n izmerene vrednosti fizičke veličine, oni moraju biti realni. Ovo nameće drugi uslov, koji mora ispunjavati operator F, da bi predstavljao fizičku veličinu, a to je uslov *ermiciteta.* Ovaj se uslov matematički formuliše na sledeći način:

$$\int \psi^*\hat{F}\psi \, dV = \int \psi\hat{F}^*\psi^* \, dV \qquad (33.25)$$

(integral bez granica, u prethodnom izrazu i u daljem tekstu podrazumeva integraciju po celom prostoru).

Može se pokazati da iz uslova (38.25) sledi realnost numeričkih vrednosti F. Ukoliko se pretpostavi da F može imati i kompleksne vrednosti, jednačina (33.23) i njoj konjugovana jednačina glase:

$$\hat{F}\psi = F\psi \qquad (33.26)$$

$$\hat{F}^*\psi^* = F^*\psi^* \qquad (33.27)$$

Množenjem (33.26) sa F^*, a (33.27) sa ψ i integracijom po celokupnom prostoru, dobija se:

$$\int \psi^* \hat{F} \psi \, dV = F \int \psi^* \psi \, dV \tag{33.28}$$

$$\int \psi \hat{F}^* \psi^* \, dV = F^* \int \psi^* \psi \, dV \tag{33.29}$$

S obzirom na (33.25), zamenom u (33.29) i oduzimanjem od (33.28) dobija se:

$$0 = (F - F^*) \int \psi^* \psi \, dV \tag{33.30}$$

Kako je $F^* \psi \, dV \neq 0$, jer talasna funkcija u kvantnoj mehanici ne može biti jednaka nuli, da bi relacija (33.30) bila zadovoljena, ostaje uslov:

$$F^* = F \tag{33.31}$$

a ovo važi samo za realne brojeve. Pokazano je, prema tome, da su svojstvene vrednosti ermitskog operatora, koji ispunjava uslov (33.25), realni brojevi.

Rezimirajući izloženo, može se reći da kvantnomehanički operator fizičke veličine mora biti *linearan i ermitski*. Linearnost operatora je potrebna zbog principa superpozicije, dok je ermicitet potreban zbog činjenice da su izmerene vrednosti fizičke veličine realni brojevi.

Korespondencija između fizičkih veličina i odgovarajućih operatora zavisi od predstavljanja talasne funkcije. U koordinatnoj reprezentaciji, gde ψ zavisi od koordinate (i vremena), koordinati čestice korespondira (pripisuje) se multiplikativni operator (tj. operator, čije je dejstvo na funkciju stanja — množenje):

$$x \to \hat{x} \text{ (operator)} \tag{33.32}$$

sa dejstvom:

$$\hat{x}\{\psi(x, t)\} = x \cdot \psi(x, t) \tag{33.33}$$

Impulsu čestice, koja se kreće u pravcu x-ose, odnosno p_x, korespondira (pripisuje) se diferencijalni operator:

$$p_x \to \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \tag{33.34}$$

čije je dejstvo na ψ:

$$\hat{p}_x\{\psi(x, t)\} = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \tag{33.35}$$

Dalje, svakoj fizičkoj veličini koja je u klasičnoj fizici funkcija koordinate i impulsa korespondira se operator po pravilu:

$$F(x, p_x) \to \hat{F}\left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{33.36}$$

Na primer, za kinetičku energiju čestice (koja se kreće u pravcu x-ose) se dobija:

$$E_k = \frac{1}{2} m v_x^2 = \frac{1}{2m} p_x^2 \to \frac{1}{2m}\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{33.37}$$

Jednostavno se dokazuje da operatori koordinate i impulsa definisani relacijama (33.32) i (33.34) ne komutiraju. Razlika:

$$(\hat{x} \cdot \hat{p}_x - \hat{p}_x \cdot \hat{x}) \equiv [\hat{x}, \hat{p}_x] \tag{33.38}$$

naziva se *komutator* operatora koordinate i impulsa. Ako se ovaj komutator primeni na proizvoljnu funkciju stanja $\psi(x, t)$, dobija se:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi = \left\{x \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \cdot x\right\}\psi = -i\hbar\left\{x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\right\} =$$

$$= -i\hbar\left\{x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial x}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial x}\right\} = i\hbar \psi,$$

odnosno:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \tag{33.39}$$

Komutator je različit od nule, što znači da operatori koordinate i impulsa ne komutiraju, u skladu sa relacijom neodređenosti (33.2) koja tvrdi da se koordinata i impuls se ne mogu simultano odrediti sa proizvoljnom tačnošću.

c. Postulat o očekivanim vrednostima rezultata merenja

Ovim se postulatom određuje kako se, pomoću poznate talasne funkcije sistema ψ i pomoću operatora $\hat{F}$ neke fizičke veličine f, izračunava najverovatniji rezultat merenja te fizičke veličine. Pri opisivanju svojstvenog problema operatora (33.24), rečeno je da svakaš vojstvena vrednost operatora F_n odgovara jednom od mogućih rezultata merenja. Verovatnoće dobijanja pojedinih rezultata se, međutim, razlikuju i zbog toga je neophodno da se definiše najverovatniji rezultat merenja, odnosno očekivana vrednost rezultata merenja: „*Očekivana vrednost rezultata merenja fizičke veličine f, na kvantnom sistemu, koji opisuje normirana talasna funkcija ψ, izračunava se prema*:

$$\overline{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi \, dV \tag{33.40}$$

Očekivana vrednost fizičke veličine f označena je u relaciji (33.40) simbolom za srednju vrednost $\overline{F}$, jer se ona i dobija kao srednja vrednost rezultata većeg broja merenja na mikroobjektima iste vrste.

d. Postulat o vremenskoj evoluciji talasne funkcije (jednačina Šredingera)

Osnovnom pretpostavkom o promeni talasne funkcije, odnosno o promeni stanja fizičkog sistema tokom vremena opisuje se u suštini dinamika kvantnomehaničkog sistema. Određuje se, naime, kako se ponaša sistem u polju dejstva neke sile. Ovaj postulat koji zamenjuje II Njutnov zakon pri opisu kretanja objekata u mikrosvetu, glasi: „*Evolucija talasne funkcije $\psi(\vec{r}, t)$ u vremenu proporcionalna je dejstvu operatora energije (hamiltonijana) na talasnu funkciju*:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t) \tag{33.41}$$

Relacija (33.41) je osnovni dinamički zakon kvantne mehanike i poznata je pod nazivom *jednačina Šredingera*[90]. Jednačinom Šredingera se ponašanje kvantnih objekata opisuje u nerelativističkoj aproksimaciji, što znači da se ona ne može upotrebiti za opis kvantnih pojava koje se dešavaju pri velikim brzinama kretanja. Relativističko uopštenje Šredingerove jednačine formulisao je Dirak.

U (nerelativističkoj) klasičnoj fizici ukupna energija čestice je zbir njene kinetičke $p^2/2m$ i potencijalne $U(\vec{r}, t)$ energije,

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}, t) \tag{33.42}$$

Operator energije (ili Hamiltonov operator $\hat{H}$) se dobija kada se u relaciji (33.42) klasične promenljive zamene operatorima prema pravilu korespondencije (33.36):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U(\vec{r}, t) \tag{33.43}$$

S obzirom da je koordinata u kvantnoj mehanici, prema (33.33), multiplikativni operator, a vreme parametar, operator potencijalne energije, kojim se opisuje polje sile u kojem se čestica kreće ima isti matematički oblik kao u klasičnoj fizici (naravno pod pretpostavkom da potencijalna energija zavisi samo od koordinate i vremena). U relaciji (33.43) operator u zagradama se naziva *Laplasov operator*, obeležava se sa Δ, odnosno:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{33.44}$$

Korišćenjem relacija (33.43) i (33.44) jednačina Šredingera se može napisati u obliku:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi \tag{33.45}$$

Kao što se vidi, u Šredingerovoj jednačini javljaju se kao parametri datog mikroobjekta masa m i potencijalna energija U. Ako su masa i potencijalna energija neke čestice poznate, za nju se može napisati jednačina Šredingera. Rešavanjem ove jednačine dobija se talasna funkcija čestice.

Na kraju treba istaći da je rešavanje jednačine Šredingera obično složen matematički problem. Metode kvantne mehanike mogu se, zbog toga, ilustrovati samo na izuzetno uprošćenim fizičkim primerima.

34. STACIONARNA STANJA ČESTICE

34.1. ŠREDINGEROVA JEDNAČINA ZA STACIONARNA STANJA

Posebno je važno upoznati kvantnomehanički opis stacionarnih stanja. U stacionarnom stanju energija čestice je stalna. Prema (33.43), ovakva stanja čestice opisuje hamiltonijan koji ne zavisi eksplicitno od vremena, tj. koji zadovoljava

---

[90] Erwin Schrödinger (1887—1961), Austrijanac. Polazeći od De Broljeve talasno-čestične teorije o materiji, Šredinger je razvio talasnomehanički model atoma, koji predstavlja osnovu savremenih shvatanja o strukturi atoma. Godine 1933. podelio je Nobelovu nagradu sa Dirakom koji je razvio relativističku talasnu mehaniku.

uslov:

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{H} = 0 \tag{34.1}$$

Hamiltonijan $\hat{H}$ eksplicitno ne zavisi od vremena ukoliko potencijalna energija U ne zavisi od vremena. Tada je polje sila, u kojem se čestica kreće, stacionarno.

Kada se kvantnomehanički objekt nalazi u stacionarnom stanju, Šredingerova jednačina (33.45) može se rastaviti na dve jednačine, od kojih jedna zavisi samo od vremena, a druga samo od koordinata. Postupak razdvajanja je sledeći.

Ako se sa $\Phi(\vec{r}, t)$ označi talasna funkcija stacionarnih stanja, tada Šredingerova jednačina (33.45) dobija oblik:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi(\vec{r}, t) = \hat{H}(\vec{r})\,\Phi(\vec{r}, t) \tag{34.2}$$

Rešenje ove jednačine se traži u obliku proizvoda jedne funkcije vremena i jedne funkcije koordinata:

$$\Phi(\vec{r}, t) = \alpha(t)\,\psi(\vec{r}) \tag{34.3}$$

pa relacija (34.2) dobija oblik (uzimajući da $\partial/\partial t \to d/dt$, jer α zavisi samo od t):

$$i\hbar\,\psi(\vec{r})\frac{d}{dt}\alpha(t) = \alpha(t)\,\hat{H}(\vec{r})\,\psi(\vec{r}).$$

Deljenjem poslednjeg izraza sa $\alpha(t)\psi(r)$ dobija se:

$$\frac{1}{\alpha(t)}\,i\hbar\frac{d}{dt}\alpha(t) = \frac{1}{\psi(\vec{r})}\hat{H}(\vec{r})\,\psi(\vec{r}) \tag{34.4}$$

Leva strana jednačine (34.4) zavisi samo od vremena, a desna strana samo od koordinata. Jednakost može biti zadovoljena za svako $\vec{r}$ i t, ako je svaka od strana jednačine ponaosob jednaka nekoj konstanti koja ne zavisi ni od koordinata, niti od vremena. Ta je konstanta ukupna (totalna) energija čestice E. Prema tome, jednačina (34.4) se može napisati kao:

$$\frac{1}{\alpha(t)}\,i\hbar\frac{d}{dt}\alpha(t) = \frac{1}{\psi(\vec{r})}\hat{H}(\vec{r})\,\psi(\vec{r}) = E = \text{const} \tag{34.5}$$

Relacija (34.5) se svodi na dve:

$$\frac{1}{\alpha(t)}\,i\hbar\frac{d}{dt}\alpha(t) = E \tag{34.6}$$

i

$$\hat{H}(\vec{r})\,\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}) \tag{34.7}$$

Jednačina (34.6) se jednostavno rešava:

$$\frac{d[\alpha(t)]}{\alpha(t)} = -i\frac{E}{\hbar}\,dt \;\Rightarrow\; \ln[\alpha(t)] = -i\frac{E}{\hbar}t + \ln C,$$

ili

$$\alpha(t) = Ce^{-i(E/\hbar)t} \tag{34.8}$$

Jednačina (34.7) predstavlja svojstveni problem operatora energije i rešava se od slučaja do slučaja, zavisno od oblika potencijalne energije.

Na osnovu relacija (34.3) i (34.8) može se talasna funkcija stacionarnih stanja napisati u obliku:

$$\Phi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})\, Ce^{-i(E/\hbar)t} \tag{34.9}$$

gde se $\psi(\vec{r})$ nalazi kao rešenje svojstvenog problema hamiltonijana iz jednačine (34.7).

Da bi se dokazala ispravnost relacije (34.9) uvrstimo je u jednačinu (33.45). Tada se dobija:

$$i\hbar\left(-i\frac{E}{\hbar}\right)\psi\, Ce^{-i(E/\hbar)t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\, Ce^{-i(E/\hbar)t}\,\Delta\psi + U\psi\, Ce^{-i(E/\hbar)t}$$

Nakon skraćivanja sa $Ce^{-i(E/\hbar)t}$ dolazi se do jednačine (34.7):

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi.$$

Znači da se za stacionarna stanja talasna funkcija $\Phi(\vec{r}, t)$ može uvek izraziti kao proizvod dve funkcije, od kojih jedna zavisi samo od vremena, a druga samo od koordinata. Vremenska funkcija je uvek određena relacijom (34.8), dok se talasna funkcija $\psi(\vec{r})$ koja zavisi samo od položaja čestice dobija kao rešenje jednačine:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \tag{34.10}$$

koja se naziva *jednačina Šredingera za stacionarna stanja*.

U slučaju da se čestica kreće u pravcu jedne od koordinatnih osa, na primer, x-ose, jednačina (34.10) dobija oblik:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \tag{34.11}$$

Rešavanjem Šredingerove jednačine (43.10), tj. svojstvenog problema operatora energije nalaze se talasne funkcije stacionarnih stanja, odnosno određuju se verovatnoće nalaženja čestice u različitim tačkama prostora. Od svih mogućih rešenja diferencijalne jednačine (34.10), moraju se odabrati one talasne funkcije koje su jednoznačne, neprekidne i (po modulu) kvadratno integrabilne i zadovoljavaju granične uslove datog fizičkog problema, jer se samo takvim funkcijama može pripisati fizički smisao.

Iz jednačine (34.10) i uslova koje mora da zadovolji talasna funkcija neposredno proističu diskretne vrednosti energije. Na sličan način iz postulata kvantne mehanike direktno slede i diskretne (kvantirane) vrednosti drugih merljivih veličina. Na primer, rešavanjem svojstvenog problema operatora momenta impulsa i primenom navedenih uslova za talasnu funkciju dobijaju diskretne svojstvene vrednosti za moment impulsa.

---

[91] U zavisnosti od oblika eksponenta koristi se: $e^x = \exp\{x\}$.

Skup svojstvenih vrednosti često se naziva *spektar* fizičke veličine. Ako je taj skup prebrojiv[92], dobijeni spektar je *diskretni*. Ako svojstvene vrednostosti obrazuju neprebrojiv skup[93], dobija se *kontinuirani spektar*.

Nalaženje svojstvenih vrednosti i svojstvenih funkcija operatora uglavnom predstavlja težak matematički problem. U sledećim poglavljima analizira se nekoliko kvantnomehaničkih problema, koji se mogu relativno lako rešiti, a pri tome znatno doprinose razumevanju ponašanje čestica mikrosveta.

34.2. KRETANJE SLOBODNE ČESTICE

Za česticu se kaže da je slobodna, ako se sa stalnim impulsom p kreće po inerciji, van polja sila. U odsustvu polja sila potencijalna energija je jednaka nuli ($U=0$) te se slobodno kretanje čestice duž x-ose na osnovu (34.11) opisuje jednačinom:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \tag{34.12}$$

Kako je za slobodnu česticu $E=p^2/2m$, na osnovu (32.4) se dobija:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{p^2}{2m} = \frac{p^2}{\hbar^2} = k^2 \tag{34.13}$$

te jednačina (34.12) prelazi u oblik poznat iz teorije oscilacija:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \tag{34.14}$$

Za svaku vrednost k (odnosno E) ova jednačina ima kompleksno rešenje[94]:

$$\psi(x) = C_1 e^{ikx} \tag{34.15}$$

Na osnovu (34.9) talasna funkcija slobodne čestice koja se kreće u pravcu i smeru x-ose ima oblik:

$$\Phi(x, t) = C_1 \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right\} \tag{34.16}$$

Funkcija (34.16) se naziva kvantnomehanički ravni talas. Slobodna čestica opisana ovim talasom može imati bilo koje vrednosti energije, tj. ima kontinuirani spektar svojstvenih vrednosti energije.

Iz relacije (34.16) se vidi da je za slobodnu česticu:

$$|\Phi|^2 = \Phi\Phi^* = C_1^2 = \text{const} \tag{34.17}$$

S obzirom da kvadrat modula talasne funkcije slobodne čestice ne zavisi od koordinate, na osnovu (33.14) može se zaključiti da se ona sa podjednakom verovatno-

---

[92] Prebrojiv skup sačinjavaju elementi, koji se mogu označiti celobrojnim indeksom, na primer: $A_1, A_2, \ldots$, itd.

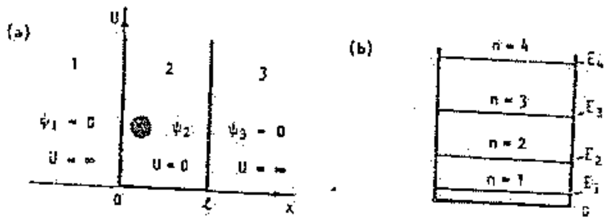
[93] Neprebrojiv skup sačinjavaju elementi koji su funkcije kontinuirane promenljive, na primer: $f(x)$, pri čemu se x kontinuirano menja.

[94] Vrednost konstante C_1 se dobija normiranjem talasne funkcije sa kontinuiranim spektrom. Matematički detalji ovog postupka prevazilaze okvir ovoga kursa.

čom nalazi u bilo kojem delu prostora. Ovo je u skladu sa Hajzenbergovim principom neodređenosti (33.2), jer je uvođenjem pretpostavke o tačno određenom impulsu $E=p^2/2m$ odbačena mogućnost da o položaju čestice bude nešto poznato. Ovakvo idealizovano kretanje se ne javlja u prirodi (na česticu uvek deluje neka sila), ali se u mnogim kvantnomehaničkim proračunima kretanje čestice u polju slabih sila može dovoljno tačno opisati ravnim talasom.

34.3. ČESTICA U BESKONAČNO DUBOKOJ POTENCIJALNOJ JAMI

Posmatrajmo kretanje mikročestice duž x-ose u potencijalnoj jami pravougaonog oblika beskonačne dubine, kao na sl. 34.1 a. To je ekvivalentno kretanje molekula gasa u nekoj kutiji čvrstih zidova. Molekul se slobodno kreće sve dok ne pogodi zid i od njega se elastično odbije. Slična je situacija sa slobodnim elektronom u komadu metala, ako se zanemare retke interakcije sa pozitivnim jonima i ako je visina potencijalne barijere (izlazni rad) mnogo veća od kinetičke energije elektrona. U tom slučaju se elektron slobodno kreće kroz metal, ali ga ne može napustiti.



Sl. 34.1

Čestica se u potencijalnoj jami slobodno kreće i ograničena je nepropusnim zidovima na mestima $x=0$ i $x=l$. Potencijalna energija U je u tom slučaju zadata prekidnom funkcijom oblika:

$$U(x)=\begin{cases}\infty & x<0\\ 0 & 0\leq x\leq l\\ \infty & x>0\end{cases} \tag{34.18}$$

Bez obzira kolika je energija čestice E, ona se ne može naći levo od tačke 0 i desno od tačke l. Prema tome u oblasti 1 i 3 talasna funkcija čestice mora biti identički jednaka nuli:

$$\psi_{1(x<0)}=\psi_{3(x>l)}=0.$$

S obzirom da talasna funkcija mora biti neprekidna, treba imati jednake vrednosti i na granici jame:

$$\psi_2(0)=\psi_2(l)=0 \tag{34.19}$$

U samoj jami gde se čestica nalazi (oblast 2) potencijalna je energija jednaka nuli ($U=0$), te je kretanje čestice opisano rešenjem jednačine (34.14) koje se u ovom slučaju (čestica se kreće levo ili desno duž x-ose) piše u obliku:

$$\psi_2(x)=C_1 e^{ikx}+C_2 e^{-ikx}$$

koji se primenom Ojlerovih relacija (23.45) može transformisati u dobro poznat[95] izraz:

$$\psi_2(x)=A\sin(kx+\alpha) \tag{34.20}$$

Uslovi (34.19) mogu biti zadovoljeni izborom vrednosti za konstante k i α. Pre svega, iz uslova $\psi_2(0)=0$, dobija se:

$$\psi_2(0)=A\sin\alpha=0,$$

odakle sledi da mora biti $\alpha=0$. Nadalje, mora biti zadovoljen uslov:

$$\psi_2(l)=A\sin kl=0,$$

što je moguće samo u slučaju ako je:

$$kl=\pm n\pi, \qquad n=1,2,3,\ldots \tag{34.21}$$

Vrednost $n=0$ otpada, jer je u tom slučaju $\psi=0$, što bi značilo da u potencijalnoj jami nema čestice. Negativne vrednosti n menjaju talasnu funkciju za nebitan fazni faktor, pa nema potrebe da se uzimaju u obzir.

Zamenom k iz relacije (34.13) u (34.21), dobijaju se svojstvene vrednosti energije čestice:

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2, \qquad n=1,2,3,\ldots \tag{34.22}$$

Iz relacije (34.22) sledi da energija čestice u potencijalnoj jami ne može imati bilo koju vrednost, već je ona kvantovana. Spektar energije je diskretan. Na sl. 34.1. b prikazana je shema energetskih nivoa čestice u beskonačnoj jami. Stanje čestice sa najmanjom mogućom energijom E_1 ($n=1$) naziva se *osnovno stanje*:

$$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} \tag{34.23}$$

a sva viša stanja nazivaju se *pobuđena*. Razlika energije između dva susedna energetska nivoa za česticu mase m i širinu jame l je:

$$\Delta E=E_{n+1}-E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(2n+1) \tag{34.24}$$

Na primer, za elektron ($m=9{,}11\times10^{-31}$ kg) u potencijalnoj jami atomskih dimenzija ($l=10^{-10}$ m) razlika energetskih nivoa E_2-E_1, prema (34.24), ima vrednost:

$$\Delta E=1{,}81\times10^{-17}\,\mathrm{J}=112{,}8\ \mathrm{eV}.$$

Ako se, međutim, uzme molekul vodonika mase $m=3{,}35\times10^{-27}$ kg u kutiji čija je dužina stranice $l=10^{-2}$ m, dobija se:

$$\Delta E_H=4{,}92\times10^{-37}\,\mathrm{J}=3{,}07\times10^{-18}\ \mathrm{eV}.$$

Iz navedenih primera se vidi da je kvantovanje energije elektrona u atomskih dimenzijama oštro izraženo, dok je kod molekula gasa (u sudu makroskopskih dimenzija) razlika u kvantnim nivoima zanemarljivo mala, pa se skoro može uzeti da se energija menja kontinualno. Prema tome, diskretne promene energije izražene

[95] U smislu jednačine (41.3) čije je rešenje dato relacijom (41.4), Deo I.

su oštrije samo za čestice malih masa, dok se one kreću u ograničenim oblastima malih dimenzija.

Svojstvena funkcija $\psi_n(x)$, koja odgovara svojstvenoj energiji E_n (34.22), se dobija ako se u relaciju (34.20) uvrsti izraz za k iz uslova (34.21) i uvede vrednost $\alpha=0$, odnosno

$$\psi_n(x) = A \sin\frac{n\pi}{l}x \tag{34.25}$$

Amplituda A određuje se iz uslova normiranja (33.18), koji se u datom slučaju može napisati kao:

$$A^2 \int_0^l \sin^2\frac{n\pi}{l}x\,dx = 1.$$

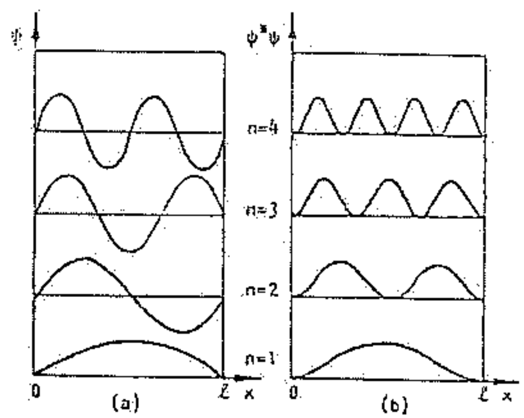
Nakon integracije dobija se konstanta A za sve vrednosti n:

$$A = \sqrt{2/l} \tag{34.26}$$

Prema tome, konačan oblik svojstvene funkcije je:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{n\pi}{l}x, \quad n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots \tag{35.37}$$

Na sl. 34.2. a prikazan je izgled svojstvenih funkcija za četiri najniža energetska nivoa.

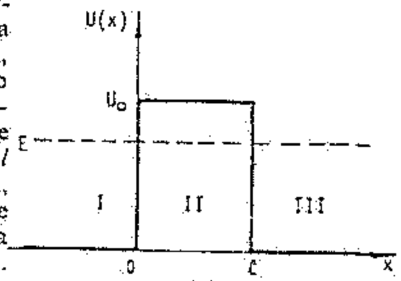


Sl. 34.2

Dobijeni rezultati, za česticu u potencijalnoj jami pokazuju karakteristične osobine kvantnomehaničkih rešenja. Kao što se vidi, na osnovu (34.22), energije čestice su diskretne i najniža vrednost energije nije jednaka nuli, što je u skladu sa principom neodređenosti. Diskretan raspored energetskih nivoa pojavljuje se usled primene graničnih uslova na talasnu funkciju. Na osnovu klasične teorije, čestica bi u jednodimenzionoj kutiji sa čvrstim zidovima mogla da ima bilo koju pozitivnu vrednost energije, a njena verovatnoća nalaženja u bilo kojoj tački x bila bi $1/l$. Međutim, neslaganje između klasične i kvantne mehanike može se videti sa sl. 34.2. b, gde su prikazane kvantnomehaničke gustine verovatnoća nalaženja čestice na četiri najniža energetska nivoa. Broj maksimuma u raspodeli verovatnoće jednak je kvantnom broju n. Sa grafika se vidi da se, na primer za $n=2$, čestica ne može naći na sredini jame, dok se podjednako često nalazi kako u levoj, tako i u desnoj polovini jame. Takvo ponašanje čestice je, očigledno, nespojivo sa klasičnom predstavom o trajektoriji.

34.4. PROLAZ ČESTICE KROZ POTENCIJALNU BARIJERU

Kvalitativna razlika svojstava makro i mikro čestica naročito se jasno ispoljava u njihovom ponašanju pri susretu sa potencijalnom barijerom. Za objašnjenje može da posluži sledeći primer. Posmatrajmo česticu koja se kreće sleva nadesno duž x-ose i na svom putu nailazi na potencijalnu barijeru čija je visina U_0, a širina l (sl. 34.3). Prema klasičnim predstavama, ponašanje čestice ima sledeći karakter. Ako je energija čestice veća od visine potencijalne barijere, $E>U_0$, čestica bez prepreke prolazi iznad barijere (u intervalu $0\leqslant x\leqslant l$ brzina čestice se nešto smanjuje, da bi zatim, za $x>l$, dobila prvobitnu vrednost). Ako je $E<U_0$ (kako je prikazano na sl. 34.3), čestica se odbija od barijere i leti na suprotnu stranu. Ona ne može da prođe kroz barijeru.



Sl.24.3

Ponašanje čestice sa tačke gledišta kvantne mehanike izgleda u mnogome drugačije. Kao prvo, čak i pri $E>U_0$, postoji verovatnoća različita od nule da se čestica odbije od barijere i poleti na suprotnu stranu. S druge strane i pri $E<U_0$ postoji konačna verovatnoća da čestica prođe kroz barijeru i da se nađe u oblasti gde je $x>l$. Takvo ponašanje čestice, koje je sa gledišta klasične fizike apsolutno nemoguće, sledi neposredno iz Šredingerove jednačine.

Razmotrimo slučaj $E<U_0$. U tom slučaju Šredingerova jednačina za stacionarna stanja, koja opisuje kretanje u jednoj dimenziji za oblasti I i III ima oblik:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \tag{34.28}$$

dok se za oblast II piše u obliku:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)\,\psi = 0 \tag{34.29}$$

pri čemu je $E-U_0<0$.

Rešenje jednačine (34.28) koja opisuje kretanje slobodne čestice dobija se jednostavno i na osnovu (34.15) ima oblik:

$$\left.\begin{aligned} \psi_1 &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad \text{za oblasti I} \\ \psi_3 &= A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} \quad \text{za oblasti III} \end{aligned}\right\} \tag{34.30}$$

S obzirom da je u oblasti II $U_0=$const, jednačina (34.29) se smenom

$$\frac{2m}{\hbar^2}(U_0-E) = \beta^2 \tag{34.31}$$

prevodi u oblik:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-\beta^2\psi=0 \qquad (34.32)$$

čije se opšte rešenje može izraziti kao zbir dve eksponencijalne funkcije:

$$\psi_2=A_2 e^{\beta x}+B_2 e^{-\beta x} \quad \text{za oblast II} \qquad (34.33)$$

Fizički smisao pojedinih članova u relaciji (34.30) je sledeći:

— član $A_1 e^{ikx}$ predstavlja ravan talas koji se kreće u pozitivnom smeru x-ose i prema tome predstavlja upadnu česticu ili upadni talas.

— član $B_1 e^{-ikx}$ predstavlja ravan talas koji se prostire u negativnom smeru x-ose i u datom slučaju predstavlja talas koji se odbija (reflektuje) od barijere.

— član $A_3 e^{ikx}$ predstavlja ravan talas koji se kreće u pozitivnom smeru x-ose, ali iza barijere $(x>l)$ i ovaj član predstavlja očigledno deo upadnog talasa koji je prošao kroz barijeru.

— član $B_3 e^{-ikx}$ predstavljao bi talas koji se kreće u negativnom smeru x-ose, koji očigledno u rešenju ne može da postoji, jer talas koji je prošao barijeru nema više od čega da se odbije. Uzima se da je $B_3=0$.

Talasna funkcija (34.33) opisuje ponašanje čestice u samoj barijeri i kao što se vidi ona nema periodični karakter. Prema tome, talasne funkcije koje opisuju ponašanje čestice u datom primeru date su sa:

$$\left.\begin{aligned}\psi_1&=A_1 e^{ikx}+B_1 e^{-ikx} && \text{za oblast I}\\ \psi_2&=A_2 e^{\beta x}+B_2 e^{-\beta x} && \text{za oblast II}\\ \psi_3&=A_3 e^{ikx} && \text{za oblast III}\end{aligned}\right\} \qquad (34.34)$$

Talasna funkcija mora, prema opštim pravilima kvantne mehanike, da bude neprekidna i glatka funkcija za svako x. Da bi se ovi uslovi realizovali u tački $x=0$ mora biti:

$$\psi_1(0)=\psi_2(0); \quad \psi_1'(0)=\psi_2'(0) \qquad (34.35)$$

dok za tačku $x=l$ moraju da važe uslovi:

$$\psi_2(l)=\psi_3(l); \quad \psi_2'(l)=\psi_3'(l) \qquad (34.36)$$

S obzirom na (34.34) uslovi (34.35) (34.36) se svode na sledeći sistem algebarskih jednačina:

$$\begin{aligned}A_1+B_1&=A_2+B_2,\\ A_2 e^{\beta l}+B_2 e^{-\beta l}&=A_3 e^{ikl},\\ ikA_1-ikB_1&=\beta A_2-\beta B_2,\\ \beta A_2 e^{\beta l}-\beta B_2 e^{-\beta l}&=ikA_3 e^{ikl}.\end{aligned}$$

Deobom svih jednačina sa A_1 i poslednjih dveju sa k, uz uvođenje sledećih oznaka:

$$\left.\begin{aligned}a_2=\frac{A_2}{A_1},\quad a_3=\frac{A_3}{A_1},\quad b_1=\frac{B_1}{A_1},\quad b_2=\frac{B_2}{A_1},\\ n=\frac{\beta}{k}=\sqrt{\frac{U_0-E}{E}}\end{aligned}\right\} \qquad (34.37)$$

dobija se sistem jednačina:

$$\left.\begin{aligned}1+b_1&=a_2+b_2\\ a_2 e^{\beta l}+b_2 e^{-\beta l}&=a_3 e^{ikl}\\ i-ib_1&=na_2-nb_2\\ na_2 e^{\beta l}-nb_2 e^{-\beta l}&=ia_3 e^{ikl}\end{aligned}\right\} \qquad (34.38)$$

Odnos kvadrata amplitude odbijenog i upadnog talasa određuje verovatnoću odbijanja čestice i naziva se koeficijent refleksije. Prema tome je:

$$R=\frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}=|b_1|^2 \qquad (34.39)$$

Odnos kvadrata modula talasa koji je prošao kroz barijeru i upadnog talasa predstavlja verovatnoću prolaska čestice kroz barijeru i naziva se koeficijent transparencije (prozračnosti). Na osnovu prethodne analize, za koeficijent transparencije može se pisati:

$$D=\frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}=|a_3|^2 \qquad (34.40)$$

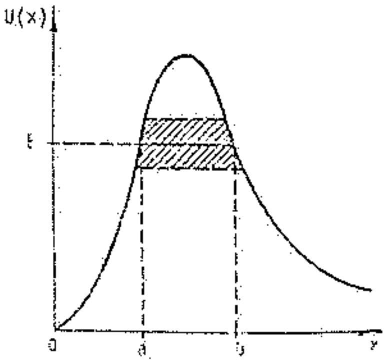
Na ovom je mestu svakako najinteresantnije ispitati koeficijent transparencije koji bi, prema klasičnoj mehanici, morao biti jednak nuli. Na osnovu kvantnomehaničkih analiza, koje su ovde izložene, vidi se da je $a_3\neq0$, što pokazuje da je prolaz kroz barijeru moguć sa određenom verovatnoćom. Koeficijent a_3 se nalazi iz sistema algebarskih jednačina (34.38). Posle nekih uprošćavanja za koeficijent transparencije se dobija sledeći izraz:

$$D=|a_3|^2\simeq exp\left\{-\frac{2\,l}{\hbar}\sqrt{2\,m(U_0-E)}\right\} \qquad (34.41)$$

Iz izraza (34.41) se vidi da verovatnoća prolaska čestice kroz barijeru u velikoj meri zavisi od širine barijere l i od razlike U_0-E. Ako je, na primer, pri nekoj širini barijere koeficijent $D=0{,}01$, tada je pri dvostrukoj širini barijere $D=0{,}0001$. Jednak se efekat postiže učetvorostručenjem razlike U_0-E. Koeficijent transparencije naglo opada sa porastom mase čestice, što znači da čestice male mase kroz barijeru prolaze lakše.

Za opšti slučaj oblika potencijalne barijere $U_0-U(x)$, (sl. 34.4), relacija (34.41) se može uopštiti u sledećem obliku:

$$D\simeq exp\left\{-\frac{2\,l}{\hbar}\int_a^b\sqrt{2\,m\,[U(x)-E]}\,dx\right\} \qquad (34.42)$$



Sl. 34.4

Pri prolasku kroz potencijalnu barijeru izgleda kao da čestica prolazi kroz tunel u barijeri (šrafirana oblast na sl. 34.4), pa se ova pojava prolaska čestice kroz barijeru naziva *tunel efekat*.

Sa tačke gledišta klasične fizike pojava tunel efekta je apsurdna, jer bi čestica u tunelu morala da ima negativnu kinetičku energiju[96]. Međutim, tunel efekat je specifično kvantna pojava koja nema analogiju u klasičnoj fizici. Tunel efekat je zapažen u mnogim oblastima fizike, na primer, u elektronici (tunel dioda) i u nuklearnoj fizici (α-raspad).

34.5. HARMONIJSKI OSCILATOR

Jednodimenzioni harmonijski oscilator je čestica koja vrši kretanje u jednoj dimenziji pod dejstvom kvazielastične (restitucione) sile $F=-kx$. Potencijalna energija ovakve čestice ima oblik:

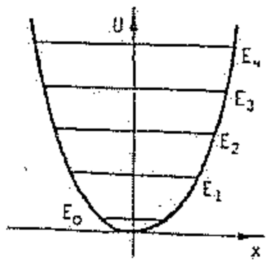
$$U=\frac{1}{2}kx^2 \tag{34.43}$$

Sopstvena frekvencija klasičnog oscilatora je $\omega=\sqrt{k/m}$, gde je m masa čestica[97]. Ako se k izrazi preko m i ω i uvrsti u relaciju (34.43), dobija se:

$$U=\frac{1}{2}m\,\omega^2 x^2 \tag{34.44}$$

S obzirom da se kretanje izvodi u pravcu jedne ose, važi Šredingerova jednačina (34.11). Zamenom vrednosti za U iz (34.44), Šredingerova jednačina za oscilator ima sledeći oblik:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{1}{2}m\,\omega^2x^2\right)\psi=0. \tag{34.45}$$



Sl. 34.5

gde je E ukupna energija oscilatora. U teoriji diferencijalnih jednačina se dokazuje da jednačina (34.45) ima po modulu kvadratno integrabilna, jednoznačna i neprekidna rešenja samo u slučaju kada parametar E uzima vrednosti:

$$E_n=(n+1/2)\,\hbar\,\omega,\quad n=0,\ 1,\ 2,\ \dots \tag{34.46}$$

Na sl. 34.5 data je shema energetskih nivoa harmonijskog oscilatora. Radi preglednosti nivoi su ucrtani u krivu potencijalne energije.

Nivoi energije harmonijskog oscilatora su ekvidistantni, tj. rastojanja između njih na energetskoj skali su međusobno jednaka. Najmanja moguća vrednost je za $n=0$ i ona iznosi: $E_0=\hbar\,\omega/2$. Ova se vrednost naziva *nulta energija*. Postojanje nulte energije dokazuje se eksperimentalno, kada se na niskim temperaturama svetlost rasejava na kristalima. Ispostavilo se da intenzitet rasejane svetlosti prilikom opadanja temperature ne teži nuli, već nekoj konačnoj vrednosti. Ovo ukazuje na to

[96] Kako je u tunelu $U-E>0$, a $E=T+U$, sledi jednostavan zaključak da u tunelu tada mora da bude $U-T-U>0$, tj. $T<0$, što klasična fizika ne dozvoljava.

[97] Vidi, poglavlje: Oscilacije, Deo I.

da i na apsolutnoj nuli oscilacije kristalne rešetke ne prestaju. Kvantna mehanika dozvoljava da se izračunaju verovatnoće različitih prelaza kvantnog sistema iz jednog stanja u drugo[98]. Proračuni ovog tipa pokazuju da su kod harmonijskog oscilatora mogući samo prelazi između susednih nivoa, a pod dejstvom električnog polja. Kod takvih prelaza kvantni broj n se menja za jedinicu:

$$\Delta n=\pm 1 \tag{34.47}$$

Uslovi koji se postavljaju za promene kvantnih brojeva prilikom prelaska sistema iz jednog stanja u drugo nazivaju se *pravila izbora*. Prema tome i za harmonijski oscilator postoji pravilo izbora izraženo relacijom (34.47).

Na osnovu pravila izbora proizlazi da se energija kvantnomehaničkog oscilatora može menjati samo u iznosima $\hbar\,\omega$. Ovaj rezultat, koji se u kvantnoj mehanici dobija na prirodan način, poklapa se sa veoma stranom za klasičnu fiziku pretpostavkom, koju je uveo Plank da bi izrazio emisionu sposobnost apsolutno crnog tela. Treba naglasiti da je Plank pretpostavio da energija harmonijskog oscilatora može da bude samo celobrojni umnožak veličine $\hbar\omega$.

34.6. MOMENT IMPULSA U KVANTNOJ MEHANICI

U klasičnoj mehanici se moment impulsa (količine kretanja) definiše relacijom (30.1, Deo I):

$$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}.$$

Prema pravilima (33.36) za formiranje kvantnomehaničkih operatora mogu se dobiti operatori $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$ kojima se opisuju moguće vrednosti kvadrata dužine i z-projekcije. Ove se vrednosti dobijaju rešavanjem svojstvenih problema:

$$\hat{L}^2\psi=L^2\psi \tag{34.48}$$

$$\hat{L}_z\psi=L_z\psi \tag{34.39}$$

Pokazalo se da svojstvene vrednosti dužine vektora momenta impulsa i njegove z-projekcije uvek zadovoljavaju relacije:

$$L=\hbar\sqrt{l(l+1)} \tag{34.50}$$

$$L_z=\hbar\,m_l \tag{34.51}$$

gde je l uvek ceo broj, a m_l može da ima vrednosti $0,\pm1,\pm2,\dots,\pm l$. Kao što se može zapaziti, iz formalizma kvantne mehanike direktno slede diskretne vrednosti kako dužine vektora momenta količine kretanja, tako i mogućih orijentacija u prostoru. Često se kaže da je vektor $\vec{L}$ kvantiran u prostoru. Mogući položaji vektora $\vec{L}$ (čija je dužina zadata sa $l=2$) u odnosu na z-osu prikazani su na sl. 34.6. Na osnovu relacije (34.50), ovaj vektor ima dužinu $L=\hbar\sqrt{6}$ i u odnosu na z-osu

[98] Verovatnoća prelaza iz stacionarnog stanja ψ_i u stanje ψ_f u polju opisanom operatorom $\hat{F}$, određena je Fermijevim zlatnim pravilom:

$$w_{fi}=\frac{2\pi}{\hbar}\int\psi_f^*\,\hat{F}\,\psi_i\,dV,$$

ako je ispunjen uslov:

$$E_f=E_i+\hbar\,\omega.$$