

8. KORPUSKULARNO-TALASNI DUALIZAM

8.1 DE BROLJIJEVA JEDNAČINA

U prethodnim poglavljima razmatrali smo pojave u kojima se ispoljavaju kvantni uticaji i čestična svojstva elektromagnetnog zračenja. Tako je Plank pojavu zračenja crnog tela razjasnio uvođenjem pretpostavke da energije oscilatora, koji emituju zračenje, moraju da budu diskretne, kvantovane. Te energije izražavaju se kao celobrojni umnošci veličine $h\nu$, gde je h nova osnovna konstanta kojom se označava jedinica, ili kvant, dejstva. Tako je početkom 20. veka u fiziku uvedeno shvatanje o „čestičnosti” energije uporedo sa starom idejom o čestičnosti materije. Polazeći od diskretnosti energije i od pojma kvanta dejstva, pored zračenja crnog tela razrešeni su i drugi krupni problemi u fizici. Na primer, objašnjeni su stabilnost atoma i fotoelektrični efekt. Usvajajući i uopštavajući Plankovu ideju o diskretnosti energije, Ajnštajn je objasnio fotoelektrični efekt tako što je pretpostavio da svetlost predstavlja mlaz diskretnih porcija energije, fotona. Slično, objašnjenje Komptonovog efekta zasnovano je na pretpostavci da fotonima mogu da se pripišu i „čestična” svojstva. Na primer, impuls, fotona kao čestice, p , može da se izrazi preko talasnih parametara, frekvencije, ν , talasne dužine, λ , i brzine talasa (svetlosti) c :

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \quad (8.1.1)$$

Kao i pre, h je Plankova konstantna. Ovi primeri pokazuju to da elektromagnetni talasi ispoljavaju dvojaku (dualnu) prirodu, čestičnu i talasnu.

Dvojstvo u smislu čestičnog i talasnog, već prihvaćeno za fotone, tj. za elektro-magnetne talase, Luj de Brolji (Prince Louis-Victor de Broglie, 1892–1987, za otkriće talasne prirode elektrona dobio je Nobelovu nagradu za fiziku 1929. godine), je 1924. godine uopštio i primenio na materijalne čestice. On je, postulirajući talase materije, svakoj čestici koja ima impuls $\vec{p} = m\vec{v}$, gde je m masa, a \vec{v} brzina, pridružio talas čija je talasna dužina λ . Pri tome je veza između talasne dužine i impulsa materijalne čestice, utvrđena istim izrazom kao i za fotone, jednačina (8.1.1):

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}. \quad (8.1.2)$$

Izraz (8.1.2) se naziva De Brogliejeva jednačina i od suštinskog je značaja u kvantnoj mehanici. Ovom jednačinom izražava se dvojnost čestica – talas. Pri tome se podrazumeva da se dvojnost javlja kao opšte svojstvo svih pojava – onih koje klasična fizika zove talasima, kao i onih koji se smatraju česticama. Sam De Broglie kaže:

„Ukratko, teorija savremene atomske fizike počiva na novim shvatanjima čestica i njima pridruženih talasa. Ova nova shvatanja postepeno su se nametnula otkrićem dvostruke prirode svetlosti; primenjena zatim na materijalne čestice, ova logika, potpuno izmenivši našu predstavu o česticama uvođenjem u teoriju materije svojstva dvojnosti (talas-čestica) otkrivenog najpre kod svetlosti, omogućila nam je da najzad sačinimo tačne teorije o atomskim pojavama”.

8.1.1 Eksperimentalna potvrda De Brogliejeve hipoteze

De Brogliejeva jednačina potvrđena je nizom eksperimenata. Prvi pokušaji da se De Brogliejeva jednačina potvrdi bili su usmereni na eksperimente u kojima bi čestice ispoljile talasna svojstva, dakle, na opažanje interferencije i difrakcije materijalnih čestica. Na primer, mlaz elektrona koji pod dejstvom napona U stiče kinetičku energiju T :

$$T = \frac{mv^2}{2} = eU$$

(m , v i e su masa, brzina i naelektrisanje elektrona, redom) odnosno impuls \vec{p} :

$$|\vec{p}| = \sqrt{2meU}$$

po De Brogliejevoj hipotezi ima talasnu dužinu λ :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meU}}. \quad (8.1.3)$$

Ako je De Brogliejeva hipoteza ispravna, mlaz treba da daje **iste** difrakcione slike posle nailaska na odgovarajući difrakcioni element, kakve bi nastale difrakcijom elektromagnetnih talasa iste talasne dužine. Talasi se primetno difraktuju samo onda kada je pukotina kroz koju prolaze istog reda veličine kao njihove talasne dužine. Ispitaćemo sada kolike mogu da budu talasne dužine elektronima pridruženih talasa. Kada se u jednačini (8.1.3) zamene brojne vrednosti prirodnih konstanti m , e i h u SI sistemu jedinica, dobija se jednačina:

$$\lambda = \frac{1,225}{\sqrt{U}}(nm) \quad (8.1.4)$$

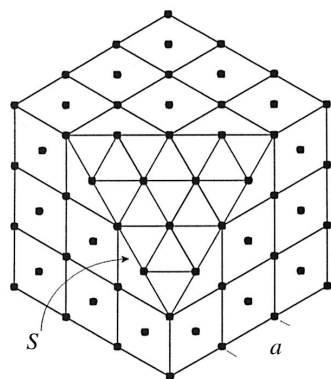
pomoću koje lako možemo da izračunamo talasnu dužinu elektrona (u nanometrima, $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$), kada je u jednačinu (8.1.4) uvrstimo vrednosti ubrzavajućeg napona u voltima. U sledećoj tabeli prikazano je nekoliko vrednosti parova λ i U :

Tabela 8.1.1 Talasne dužine pridružene elektronima

$U(\text{V})$	10	50	100	1000	2000	4000	8000	10^4
$\lambda(\text{nm})$	0,39	0,17	0,12	0,039	0,027	0,019	0,014	0,0039.

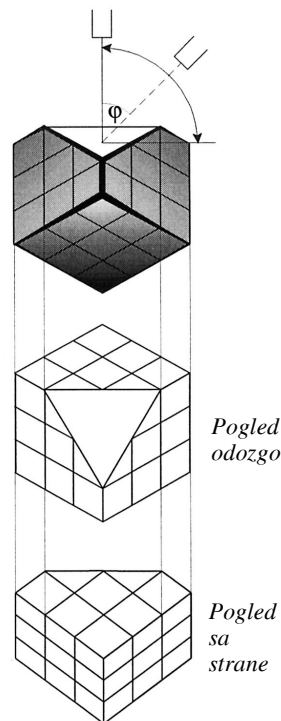
Kao što se iz tabele vidi, pri naponima koji nisu suviše veliki, elektroni stiču takav impuls kojem prema De Broljijevoj jednačini odgovara pridružena talasna dužina reda veličine angstrema ($1 \text{ nm} = 10 \text{ \AA}$). Talasnu dužinu ovog reda veličine imaju i x -zraci. U narednom delu biće reči o eksperimentima rasejavanja elektrona na kristalnoj rešetki koji su izvedeni u uverenju da bi „elektronski talasi” mogli da se difraktuju na kristalnoj rešetki na isti način kako se to događa sa x -zračenjem.

8.1.2 Devison-Džermerov eksperiment



Slika 8.1.1 Kristal nikla - raspored atoma.

K. Dž. Devison i L. H. Džermer su izveli 1927. godine prvi eksperiment kojim je potvrđena De Broljijeva hipoteza. Ideja eksperimenta bila je da se utvrdi da li se elektroni na monokristalu nekog elementa difraktuju poput x -zračenja, i da se na osnovu toga proveri De Broljijeva hipoteza. Eksperiment je izveden u visokom vakuumu da bi se izbegli sudari elektrona sa molekulima iz vazduha. Usijana volframova žica emituje elektrone koji se, ubrzani električnim poljem koje stvara ubrzavajući napon, usmeravaju na površinu monokristala nikla. Kristal nikla ima strukturu površinski centrirane kubne rešetke, a za potrebe eksperimenta sa jedne strane je zasečen tako da snop elektrona pada normalno na ravni sa Milerovim indeksima (1, 1, 1). Raspored atoma nikla na površini kristala prikazan je na Slici 8.1.1, a šema eksperimentalnog uređaja na Slici 8.1.2. Mlaz elektrona vertikalno pada na ravan kristala a rasejane elektrone detektuje jonizaciona komora (kolektor), koja rotacijom u ravni upadnog mlaza može da meri intenzitet rasejanih elektrona pod različitim uglovima ϕ , merenim u odnosu na pravac upadnog snopa, Slika 8.1.2.



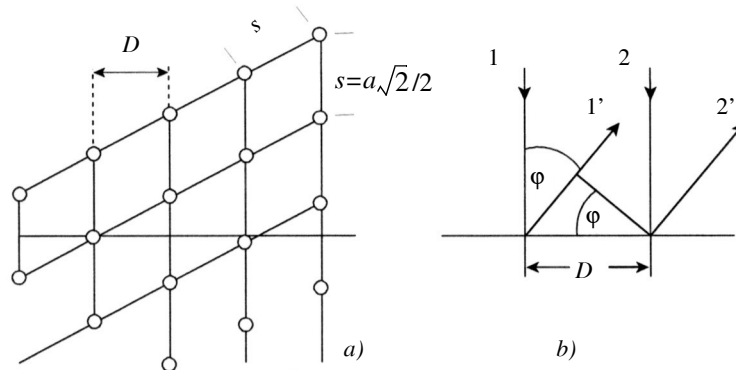
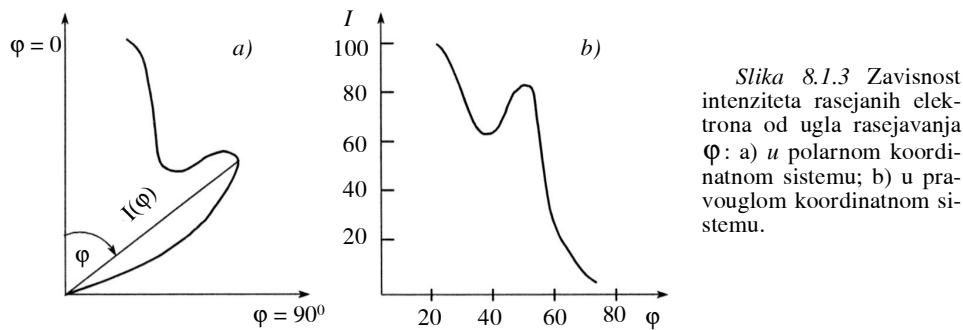
Slika 8.1.2 Šema Devison-Džermerovog eksperimenta.

Promenljivi napon koji ubrzava elektrone je reda nekoliko desetina volti. Na-ročito intenzivnu difrakciju Devison i Džermer su zapazili pri naponu od 54 V, pod uglom od 50° . Zavisnost intenziteta difraktovanih elektrona od ugla φ , pri konstantnom ubrzavajućem naponu, prikazana je polarnim dijagramom na Slici 8.1.3a. Za upoređenje, na Slici 8.1.3b prikazana je zavisnost intenziteta rasejanih elektrona od ugla φ , u pravouglom koordinatnom sistemu.

Intenzivna difrakcija (rasejavanje) elektrona u određenom pravcu, može da se shvati kao talasna pojava i da se protumači na taj način. U prvoj aproksimaciji smatraćemo da se elektronski talasi difraktuju samo sa površine kristala. Tada, po analogiji sa Bragovom jednačinom, do konstruktivne interferencije (elektronskih) talasa, rasejanih atomima nikla sa površine kristala u određenom pravcu dolazi kada je razlika njihovih puteva, δ , jednaka celobrojnom umnošku talasnih dužina, $n\lambda$.

Sa Slike 8.1.4b se vidi da putna razlika iznosi $D \sin \varphi$, pa je, prema tome, uslov za konstruktivnu interferenciju:

$$\delta = D \sin \varphi = n\lambda. \quad (8.1.5)$$



Veličina D odgovara rastojanju između ekvidistantnih linija koje spajaju nizove atoma na površini kristala, dakle u ravni normalnoj na ravan upadnog i difraktovanog snopa, Slika 8.1.4a. Sa Slike 8.1.4a sledi da je D visina ravnostranog

trougla čija je stranica s , $D = s\sqrt{3}/2$. Prema Slici 8.1.1 s odgovara polovini male dijagonale elementarne ćelije nikla, $s = a\sqrt{2}/2$. Za kristalnu rešetku nikla (ivica elementarne ćelije) $a = 0,351$ nm, pa je:

$$D = 3,51 \times \frac{\sqrt{2}}{2} \times \frac{\sqrt{3}}{2} = 0,215 \text{ nm}.$$

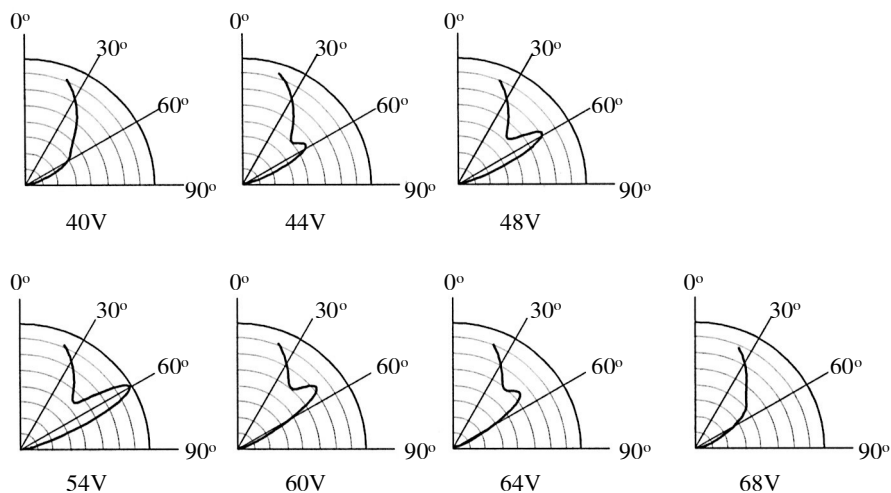
Zamenom dobijene vrednosti za D , i ugla φ za koji se dobija intenzivna difrakcija ($\varphi = 50^\circ$), u jednačini (8.1.5), nalazimo talasnu dužinu rasejanih elektrona:

$$\lambda_1 = 0,215 \sin 50^\circ = 0,215 \times 0,766 = 0,165 \text{ nm}. \quad (8.1.6)$$

Za iste elektrone, ubrzane naponom od 54 V, prema De Broljijevoj jednačini, izraz (8.1.4), nalazimo:

$$\lambda_2 = \frac{1,225}{\sqrt{U}} = \frac{1,225}{\sqrt{54}} = 0,1667 \text{ nm}. \quad (8.1.7)$$

Dobro slaganje između vrednosti talasne dužine λ_2 , dobijene iz De Broljijeve jednačine i λ_1 , izračunate iz uslova za konstruktivnu interferenciju talasa, potvrđuje valjanost De Broljijeve hipoteze.



Slika 8.1.5 Polarni dijagram rasejanih elektrona sa nikla. Slike pokazuju zavisnost intenziteta rasejanih elektrona od ubrzavajućeg napona.

Ovako pojednostavljena teorija, koja razmatra rasejanje samo sa atoma na površini kristala, nije u stanju da potpuno objasni Devison-Džermerov eksperiment. Kada bi se elektroni difraktovali samo sa površine kristala, tada bi do konstruktivne interferencije dolazilo kada se ispuni uslov (8.1.5), bez obzira na veličinu ubrzavajućeg napona. Međutim, Devison i Džermer su utvrdili da je difrakcioni maksimum vrlo slabo izražen za napone različite od 54 V, Slika 8.1.5. Dakle, nije dovoljno razmatrati rasejanje sa površine kristala već treba uzeti u obzir, kao u slučaju x -zračenja,

i difrakciju sa atoma koji leže u dubini kristala. Slika 8.1.6 pokazuje relativne odnose između upadnih elektrona koji padaju normalno na površinu kristala, elektrona rasejanih pod uglom φ , i zamišljenih slojnih ravni kristala sa kojih se upadni elektroni reflektuju. Normalno, u kristalu postoje samo čvorovi (u kojima su, u ovom slučaju, smešteni atomi nikla) a slojne ravni se konstruišu prema potrebi i to tako da svaka ravan prolazi kroz izvestan broj čvorova. Raspored čvorova u svakoj ravni je identičan a rastojanje među slojnim ravnima je dovoljno malo da među njima nema slobodnih čvorova kristalne rešetke. Dakle, difrakcija elektrona sa atoma u kristalnoj rešetki, pod uglom φ , može se shvatiti kao refleksija elektrona sa slojnih ravni koje su konstruisane pod uglom α u odnosu na površinu kristala. Zbog jednostavnosti, razmatramo refleksiju sa slojnih ravni koje su normalne na ravan crteža tako da se na crtež projektuju kao niz kosih linija. S obzirom na to da su slojne ravni povučene tako da se upadni snop sa njih reflektuje, među uglovima α i φ postoji očigledna veza, $\varphi = 2\alpha$, Slika 8.1.6. Do pojave konstruktivne interferencije (jakog mlaza difraktovanih elektrona) dolazi kada se ispuni Bragov uslov, jednačina (5.2.6):

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

gde je d rastojanje među slojnim ravnima sa kojih dolazi do refleksije a ugao θ se meri od slojne ravni do upadnog zraka, Slika 8.1.6. Rastojanje d može da se izrazi preko rastojanja među atomima na površini kristala, D , i ugla koji slojne ravni zaklapaju sa površinom kristala, α :

$$d = D \sin \alpha. \quad (8.1.8)$$

S obzirom na to da su uglovi θ i α komplementarni, $\theta + \alpha = \pi/2$, Bragov uslov za konstruktivnu interferenciju možemo da napišemo u obliku:

$$2d \sin(\pi/2 - \alpha) = 2d \cos \alpha = n\lambda. \quad (8.1.9)$$

Zamenom d iz (8.1.8) u (8.1.9) nalazimo da je:

$$2D \sin \alpha \cos \alpha = D \sin 2\alpha = n\lambda$$

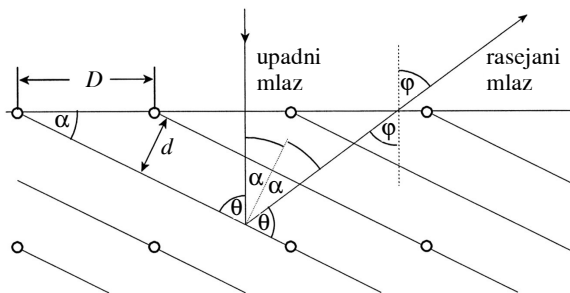
a imajući u vidu da je $2\alpha = \varphi$, Slika 8.1.6, sledi:

$$D \sin \varphi = n\lambda.$$

Poslednja jednakost je ista kao i jednačina (8.1.5), dakle, uslov za difrakciju je isti bez obzira na to da li se razmatra rasejanje samo sa površine kristala ili i po njegovoj zapremini. Međutim, postoji bitna razlika između dva slučaja difrakcije. Za difrakciju po zapremini kristala, pored uslova (8.1.9) treba da se ispuni još i uslov da slojne ravni konstruisane pod uglom α imaju dovoljno veliku retikularnu gustinu¹⁰ da se refleksija sa njih ispolji kao očigledni maksimum. Ako ovakve ravni ne mogu da

¹⁰ Retikularnu gustinu definišemo kao broj atoma po jedinici dužine.

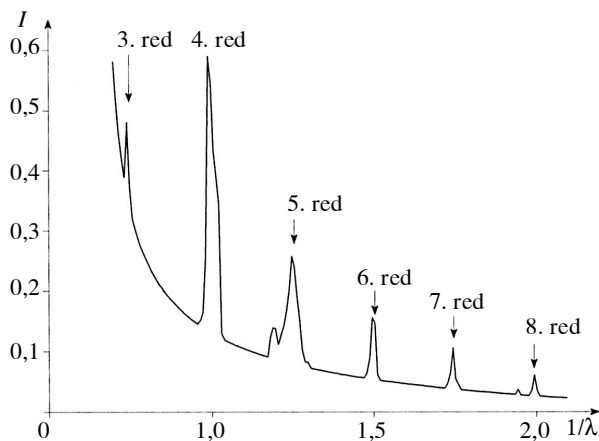
Slika 8.1.6 Refleksija elektron-skih talasa sa paralelnih ravni koje zaklapaju ugao α sa površinom kristala.



se povuku, tada se izraziti difrakcioni maksimum i ne pojavljuje čak i kada je ispunjen Bragov uslov. Prema tome, uslov za konstruktivnu interferenciju (8.1.5) jeste potreban ali ne i dovoljan za nastajanje difrakcionog maksimuma. Dodatni uslov je da ravni pod uglom α u odnosu na površinu kristala (uvek je $2\alpha = \varphi$) imaju dovoljno veliki broj atoma po jedinici površine. Dva uslova za konstruktivnu interferenciju mogu se izraziti na sledeći način:

$$\lambda = \frac{D \sin \varphi}{n} = \frac{D \sin 2\alpha}{n} . \quad (8.1.10)$$

Slika 8.1.7 Zavisnost intenziteta difraktovanog snopa od talasne dužine, pri stalnom uglu difrakcije φ .

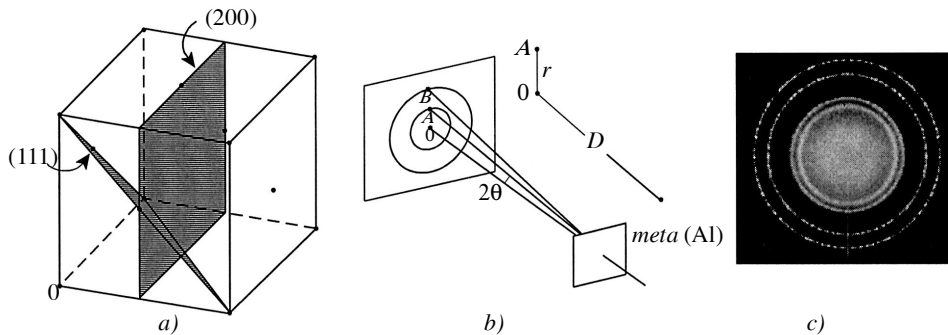


Iz jednačine (8.1.10) sledi da serija difrakcionih maksimuma može da se dobije ako se intenzitet snopa rasejanog pod konstantnim uglom φ meri u funkciji talasne dužine upadnih elektrona. Svaki maksimum bi odgovarao jednoj vrednosti celobrojnog faktora n . Da bi proverili i ovaj aspekt izraza (8.1.10) Devison i Džermer su merili zavisnost intenziteta rasejanih elektrona u funkciji njihove talasne dužine pri konstantnom uglu rasejanja, Slika 8.1.7. Zaista, opažena je serija difrakcionih maksimuma pri čemu svaki maksimum odgovara određenom redu difrakcije n . Time je dodatno potvrđena talasna priroda rasejanja elektrona, tj. De Broljijeva hipoteza da se materijalnim česticama mogu pripisati i talasna svojstva.

8.1.3 Difrakcija elektrona – Tomsonova metoda

Dž. P. Tomson je 1927. godine, skoro istovremeno kad i Devison i Džermer, izveo seriju eksperimenata kojima je, takođe, potvrđeno da čestice imaju talasna svojstva. Tomson je struju brzih elektrona propuštao kroz vrlo tanke metalne listiće a difraktovani elektronski snop registrovao na fotografskoj ploči. Posle razvijanja, na fotoploči uočavaju se serije koncentričnih krugova, Slika 8.1.8c, kakve bi proizveli x -zraci iste talasne dužine, Slika 8.1.9b, što ukazuje na talasnu prirodu elektronskog mlaza. Difrakciona slika može da se poremeti pomoću magneta, Slika 8.1.9c, što potvrđuje da se zaista difraktuju elektroni, a ne možda neko drugo, tokom eksperimenta, zaostalo zračenje.

Za razliku od Devison-Džermerovog, u Tomsonovom eksperimentu koriste se elektroni velikih energija, 10 i više keV, a difrakcioni element nije monokristal već polikristalni listić u kome je veliki broj kristalića proizvoljno orijentisan. Prema tome, Tomsonova metoda je ekvivalentna Debaj-Šererovoj metodi kod difrakcije x -zračenja. U jednoj varijanti Tomsonovog eksperimenta elektroni ubrzani naponom od nekoliko hiljada volti difraktuju se sa pljosni haotično usmerenih kristalića aluminijuma. Tada, za svaku energiju elektrona (i za odgovarajuću De Brolijevku talasnu dužinu elektrona) mogu da se nađu mikrokristali koji u prostoru zauzimaju položaj takav da zadovoljavaju Bragov uslov za neki niz reflektujućih ravni. Kao rezultat ovakve difrakcije na zaklonu se dobija difrakciona slika koju čine prstenovi različitih poluprečnika, Slika 8.1.8b. Aluminijum ima strukturu površinske centrirane kubne rešetke, Slika 8.1.8a. Rastojanje d među slojnim ravnima sa Milerovim indeksima (h, k, l) , za kubnu rešetku nalazimo iz relacije:



Slika 8.1.8 Šematski prikaz difrakcije elektrona na aluminijumu: a) slojne ravni u kristalu; b) geometrijski odnosi između snopa elektrona, mete i fotografske ploče; c) difrakciona slika.

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}. \quad (8.1.11)$$

gde je a dužina ivice elementarne ćelije (poznata iz merenja x -zracima). Uvešćemo brojeve $nh = H$, $nk = K$ i $nl = L$, pomoću kojih n -ti red refleksije od ravni (h, k, l) možemo da shvatimo kao refleksiju prvog reda od ravni sa Milerovim indeksima (H, K, L) . Sledi:

$$d = \frac{na}{\sqrt{H^2 + K^2 + L^2}}. \quad (8.1.12)$$

Kombinovanjem izraza (8.1.12) i Bragove jednačine za konstruktivnu interferenciju (7.2.6), dobija se:

$$\lambda = \frac{2a \sin \theta}{\sqrt{H^2 + K^2 + L^2}}. \quad (8.1.13)$$

Kao što smo već pomenuli, dobijeni sistem koncentričnih krugova, Slika 8.1.8c, može da se shvati kao rezultat konstruktivne interferencije elektronskih talasa, koji nastaju difrakcijom sa ravni sa različitim Milеровim indeksima. Primetimo da je ugao između upadnog i difraktovanog elektronskog snopa jednak dvostrukom uglu θ (ugao između upadnog snopa i ravni kristala) iz Bragove jednačine. Talasna dužina difraktovanih talasa određuje se na osnovu poznate veze između veličina koje se eksperimentalno mere i parametara uređaja. Tako sa Slike 8.1.8b sledi veza između ugla 2θ , rastojanja od mete (aluminijumska folija), do zaklona D i poluprečnika r prstena r . Kada je ugao θ mali, važi:

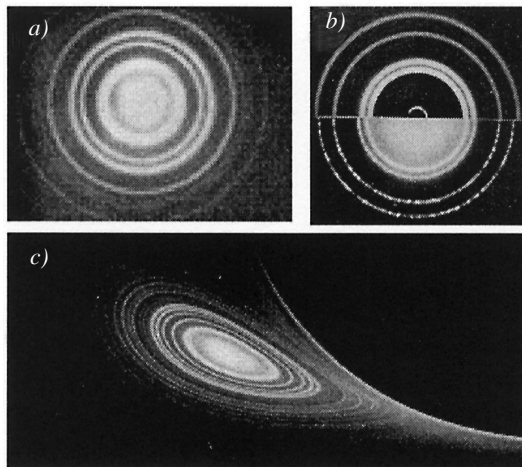
$$\operatorname{tg} 2\theta \approx \sin 2\theta \approx 2 \sin \theta \approx \frac{r}{D}. \quad (8.1.14)$$

Pod ovim uslovom jednačina (8.1.13) postaje:

$$\lambda = \frac{ar}{D} \frac{1}{\sqrt{H^2 + K^2 + L^2}} \quad (8.1.15)$$

na osnovu čega možemo da izračunamo talasnu dužinu elektrona ako je poznata ivica elementarne ćelije a . Na ovaj način određena talasna dužina elektrona može da se uporedi sa talasnom dužinom elektrona koja je dobijena iz De Broljijeve jednačine.

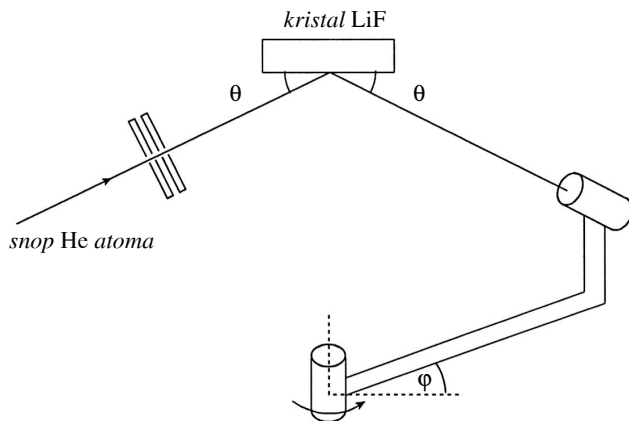
Slika 8.1.9 Difrakcione slike rasejanja elektrona: a) Tomsonova slika rasejanja elektrona sa tankog listića zlata; b) kombinovana slika rasejanja elektrona (dole) i x -zraka (gore) slične talasne dužine sa listića aluminijuma; c) difrakciona slika dobijena rasejanjem elektrona energije 40 keV pri prolazu kroz prah cink oksida. Izobličenje slike je prouzrokovano malim magnetom koji je stavljen između uzorka i fotografske ploče. Da slika potiče od rasejanja x -zraka ne bi došlo do izobličenja pod uticajem magnetnog polja.



Na Slici 8.1.9 prikazani su primeri rasejanja elektrona Tomsonovom metodom.

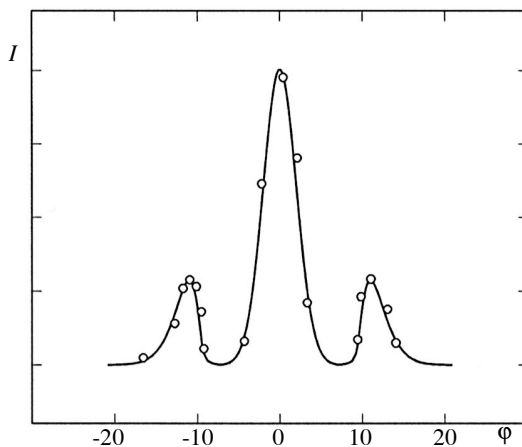
8.1.4 Difrakcija neutralnih atoma

Eksperimentom difrakcije atoma helijuma na kristalu litijum fluorida, LiF, Esterman i Štern dokazali su talasna svojstva atoma. Eksperiment je u osnovi iste vrste kao onaj koji su izveli Devison i Džermer. Kako helijumovi atomi nisu mogli da se ubrzaju do tačno određene energije, upotrebljen je snop helijumovih atoma na sobnoj temperaturi. O brzinama atoma helijuma može da se sudi na osnovu ravnotežne (Maksvelove) raspodele čestica po brzinama. Srednjoj brzini atoma helijuma (prema Maksvelov raspodeli), na temperaturi od oko 20°C , odgovarala bi kinetička energija od oko $0,03\text{ eV}$ ($4,8 \times 10^{-21}\text{ J}$), pa bi na osnovu De Broglijeve jednačine, talasna dužina λ , pridružena atomima He ove energije, iznosila oko 1 Å (tačnije $0,8\text{ Å}$).



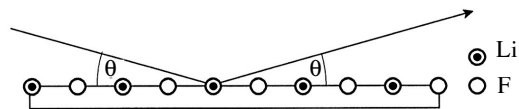
Slika 8.1.10 Šema eksperimentalnog uređaja za difrakciju atoma helijuma na kristalu LiF, prema Estermanu i Šternu.

Šema eksperimentalnog uređaja prikazana je na Slici 8.1.10. Kolimisani snop helijumovih atoma pada na površinu kristala pod uglom θ . Detektor, izvanredno osetljiv manometar, postavljen je pod istim uglom θ , a može da se okreće i oko vertikalne ose za (azimutni) ugao φ (ugao u ravni koja je normalna na ravan papira). Pri uglu $\varphi = 0^\circ$, upadni i reflektovani snop se nalazi u ravni papira.



Slika 8.1.11 Eksperimentalni rezultati. Središnji maksimum odgovara uglu $\varphi = 0^\circ$, dok sledeći maksimum pri $\varphi = 11^\circ$, odgovara difrakciji prvog reda.

Zavisnost intenziteta rasejanog snopa od ugla φ (i pri stalnom uglu $\theta = 18,5^\circ$), prikazana je na Slici 8.1.11. Prodiranje atoma (helijuma) sa tzv. termalnom energijom u unutrašnjost kristala može da se smatra zanemarljivim, pa u ovom slučaju (za razliku od Devison-Džermerovog ogleda) eksperiment može da se protumači rasejavanjem atoma helijuma sa dvodimenzionalne kristalne rešetke površine kristala.

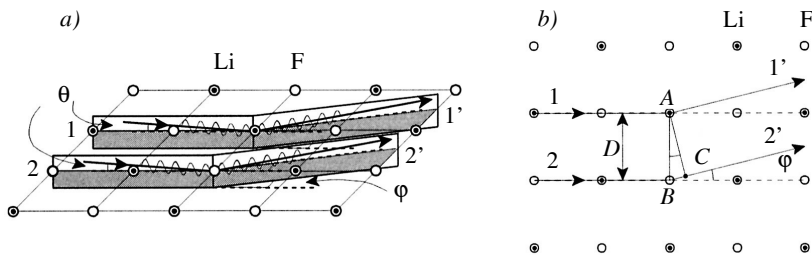


Slika 8.1.12 Upadni i difraktovani snop helijumovih atoma, pogled sa strane.

Na slikama 8.1.12 i 8.1.13 prikazana je difrakcija snopa helijumovih atoma na površini kristala LiF. Upadni zraci 1 i 2 pod malim uglom θ padaju na površinu kristala i zbog rasejanja skreću sa prvobitnog pravca pod uglom φ , Slika 8.1.13. Za dovoljno mali upadni ugao θ ($\cos \theta \sim 1$) trodimenzioni problem koji razmatramo može se svesti na problem u ravni. Potražimo pomoću Slike 8.1.13b uslov za konstruktivnu interferenciju zrakova 1' i 2'. Zrak 1' nastaje posle difrakcije zraka 1 na atomu A, a zrak 2' posle difrakcije na atomu B. Da bi došlo do konstruktivne interferencije razlika puteva zrakova 1' i 2' koja iznosi BC , treba da bude jednaka celobrojnom umnošku talasnih dužina, $n\lambda$. Iz trougla ABC sa Slike 8.1.13b neposredno dobijamo:

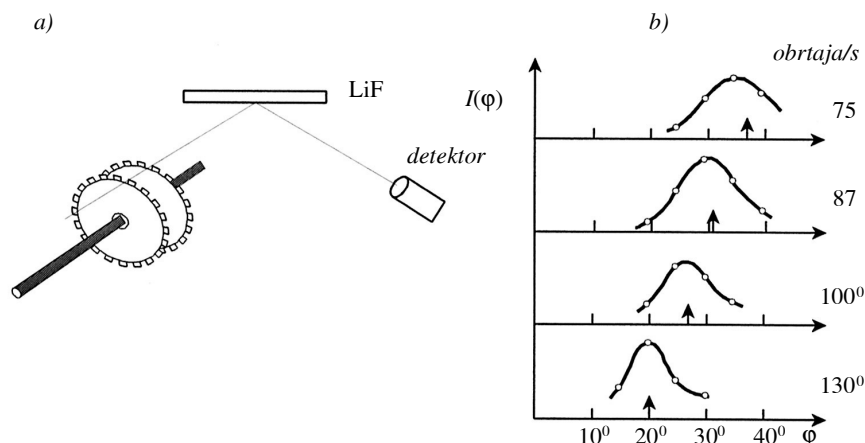
$$n\lambda = D \sin \varphi. \quad (8.1.16)$$

Talasna dužina helijumovih atoma koja sledi iz jednačine (8.1.16) može da se uporedi s onom koja se dobija iz De Broljijeve jednačine ako se za kinetičku energiju helijumovih atoma uzme srednja energija koja sledi iz Maksvel-Bolcmanove raspodele.



Slika 8.1.13 Difrakcija snopa helijumovih atoma na površini kristala LiF: a) pogled odozgo; b) pogled sa strane. Može da se pokaže da se pri malom uglu θ , difrakcioni maksimum javlja pri uslovu $\lambda = D \sin \varphi$.

Difrakcioni maksimum prvog reda dobijen je za ugao $\varphi = 11^\circ$, pa se pri vrednosti $D = 4,02 \text{ \AA}$ za talasnu dužinu λ dobija, na osnovu jednačine (8.1.16), vrednost $0,77 \text{ \AA}$. Iz De Broljijeve jednačine, pri energiji helijumovih atoma od $0,03 \text{ eV}$ (srednja energija po Maksvel-Bolcmanovoj raspodeli), dobija se vrednost za $\lambda = 0,8 \text{ \AA}$, što je sasvim uporedivo sa eksperimentalno dobijenom vrednošću.

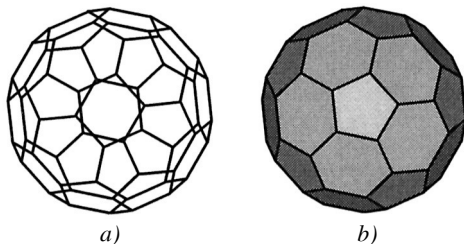


Slika 8.1.14 Šematski prikaz difrakcije atoma helijuma na LiF: a) birač brzina; b) pri većoj brzini okretanja birača brzine, izdvajaju se atomi sa većim brzinama i zapaža se pomeranje difrakcionog maksimuma ka nižim uglovima-manje λ -kao što predviđa De Broljijeva jednačina.

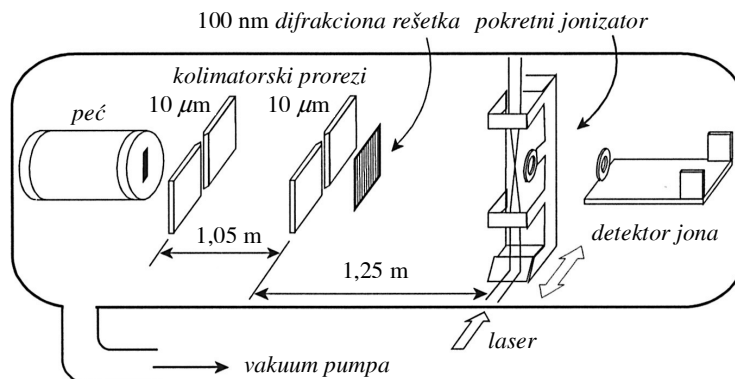
Stern i saradnici uveli su kasnije finiju verziju istog eksperimenta, uvodeći selektora brzina, Slika 8.1.14a. To su bila dva točkića sa prorezima, postavljena jedan blizu drugog, a mogli su da se okreću različitim brzinama. Pri određenoj brzini okretanja ovog selektora brzina, u sistem su ulazili atomi određenih brzina. Na Slici 8.1.14b prikazani su rezultati eksperimenta. Pri većoj brzini okretanja selektora brzina, izdvajaju se atomi sa većim brzinama i zapaža se pomeranje difrakcionog maksimuma ka nižim uglovima φ (manje λ) u saglasnosti sa De Broljijevom jednačinom.

8.1.5 Difrakcija molekula

Pitanje da li se može opaziti talasna priroda makroskopskih objekata dugo je ostalo bez odgovora, uglavnom zbog velikih eksperimentalnih problema. Naime, talasna dužina čestice opada sa porastom njene mase pa je efekte difrakcije mnogo teže opaziti nego kod lakših čestica. Zbog toga je trebalo sačekati skoro osamdeset godina da se De Broljijeva hipoteza i jednačina eksperimentalno potvrde rasejanjem molekula. Godine 1999. austrijski istraživač A. Zeller (Anton Zeller) sa saradnicima uspeo je da opazi eksperimentalno difrakciju molekula fullerena, C_{60} , Slika 8.1.15, na veštačkoj difrakcionoj rešetki.



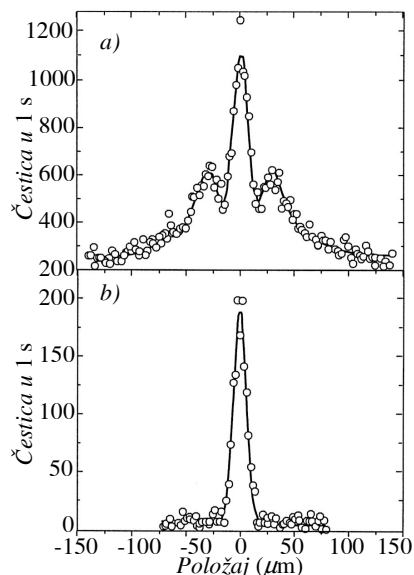
Slika 8.1.15 Molekul fullerena sastoji se od 60 ugljenikovih atoma, C_{60} : a) strukturna formula; b) molekul fullerena izgleda poput fudbalske lopte, bubamare. Atomi ugljenika smešteni su u rogljevima gde se sreću tri šava. Molekul je dobio ime po Bakmister Fulleru, poznatom arhitekti koji je pravio kupole slične konstrukcije. Ponekad se naziva i fudbalen, zbog sličnosti sa fudbalskom loptom.



Slika 8.1.16 Aparatura za difrakciju molekula fulerena na difrakcionoj rešetki.

Zelingerova aparatura prikazana je na Slici 8.1.16. Da bi se izbegli sudari snopa molekula fulerena sa molekulima iz vazduha, ceo uređaj je zatvoren u komoru koja može dobro da se evakuše tako da srednji slobodni put molekula fulerena postaje pedeset puta duži od cele putanje snopa (oko dva metra). Molekularni izvor je peć iz koje, nakon sublimacije na 900°C , molekuli fulerena izleću kroz malu pukotinu. Usmeravajući (kolimacioni) prorezi sužavaju (kolimišu) molekulski snop tako da svi molekuli padaju na površinu rešetke u vrlo uskom, paralelnom snopu. Difrakciona rešetka od silicijum nitrida, SiN_x , ima proreze od 50 nm sa periodom od 100 nm . Iza rešetke nalazi se fotojonizacioni element koji laserskim snopom jonizuje prispele molekule C_{60} . Laserski zrak je vrlo dobro fokusiran, tako da se jonizuju samo molekuli u žiži prečnika $8\text{ }\mu\text{m}$. Jonski detektor, na kraju uređaja, svojim negativnim potencijalom privlači C_{60}^{+} jone. Joni u detektoru izbijaju elektrone koji se na pogodan način broje. Dakle, broj detektovanih elektrona proporcionalan je broju jona prispelih u fokus laserskog snopa. S obzirom na to da položaj pokretnog foto jonizatora može vrlo tačno da se odredi, to se difrakciona slika neposredno dobija iz zavisnosti broja detektovanih elektrona od položaja fotojonizatora.

Molekuli fulerena izleću iz peći srednjom brzinom od 220 m/s i prolaskom kroz kolimatore usmeravaju se u paralelnom snopu na difrakcionu rešetku. Rešetka zadržava molekule koji pogode pregradu a propušta samo one koji pogode neki od proreza. Zbog talasne prirode, molekuli koji prođu kroz prorez skreću sa prvobitnog pravca što se registruje pokretnim fotojonizatorom. Laserski zrak jonizuje svaki



Slika 8.1.17 Difrakcija fulerena na difrakcionoj rešetki slićijum nitrida: a) sa rešetkom; b) bez rešetke.

molekul koji prođe kroz žižu što se ispoljava kao porast broja registrovanih elektrona u detektoru, pri određenom položaju fotojonizatora. Rezultat eksperimenta, sa rešetkom i bez nje, pokazan je na Slici 8.1.17. Bez rešetke, Slika 8.1.17b, nema skretanja molekulskog snopa, što se vidi kao jasan maksimum na nultom položaju. Sa rešetkom, dolazi do difrakcije i do pojave izraženih maksimuma s obe strane nultog položaja, Slika 8.1.17a. Pojava maksimuma prvog reda na $\pm 17\mu\text{m}$ jasno ukazuje na difrakciju molekula fullerena. Iz poznate mase i brzine molekula nalazi se da je talasna dužina De Broglievih talasa $2,5\text{ pm}$ ($2,5 \times 10^{-12}\text{m}$), što se u granicama eksperimentalne greške slaže sa talasnom dužinom izračunatom na osnovu dobijenog interferograma. (Jednostavna teorija difrakcije daje samo dobar red veličine jer ne uzima u obzir raspodelu molekula po brzinama, Van der Valsovu interakciju molekula i rešetke, konačnu širinu snopa itd. Međutim, kada se uzmu u obzir svi eksperimentalni parametri, dobija se izvrsno slaganje između De Broglijeve jednačine i eksperimenta.) Time je De Brogljeva hipoteza eksperimentalno potvrđena i sa složenijim česticama (objektima koji imaju unutrašnju strukturu i unutrašnje stepene slobode za različite oblike kretanja) dakle, i sa česticama koje su po osobinama bliske makroskopskim telima.

8.1.6 Tumačenje Borovog kvantnog uslova pomoću De Broglijeve jednačine

Pokažimo sada da pomoću De Broglijeve ideje može da se objasni Borov kvantni uslov. U Borovoj teoriji vodonikovog atoma koristi se sledeći uslov za određivanje stacionarnih orbita:

$$mvr = n \frac{h}{2\pi} \quad (8.1.17)$$

gde je mvr moment impulsa elektrona (m je masa, v je brzina elektrona, a r je poluprečnik orbite, vektori \vec{v} i \vec{r} normalni su jedan na drugi), n je ceo broj, a h Planckova konstanta. Preuređivanjem jednačine (8.1.17), dobija se:

$$2\pi r = n \frac{h}{mv}. \quad (8.1.18)$$

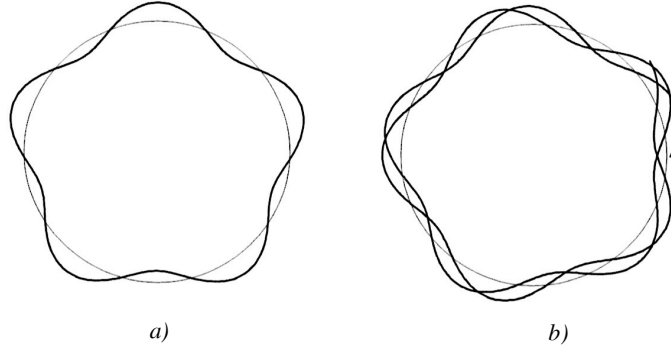
Ako umesto $h/(mv)$ uvrstimo De Brogljevu talasnu dužinu λ , nalazimo

$$2\pi r = n\lambda. \quad (8.1.19)$$

Dakle, obim stacionarne kružne orbite jednak je celobrojnom umnošku De Brogljeve talasne dužine, Slika 8.1.18a. Pri talasnim dužinama (impulsima) za koje uslov (8.1.19) nije ispunjen, dolazi do destruktivne interferencije (talasni maksimumi i minimumi se poništavaju) i takva orbitala postaje nestabilna.

8.1.7 Jednačina De Broglievih talasa

Polazeći od jednačine monohromatskog ravnog talasa, jednačina (D-3.1.13), izvešćemo izraz za De Brogljeve talase koji predstavljaju česticu energije E i impulsa p i koja se kreće slobodno (van polja sila). Između „čestičnih” odlika E i p i



Slika 8.1.18 Borov kvantni uslov i De Brolijeva jednačina: a) stacionarna kružna orbita se obrazuje kada je ispunjen uslov (8.1.19); b) za talasne dužine koje ne ispunjavaju uslov orbita je nestacionarna.

„talasnih” parametara, ugaone frekvencije ω (ili linearne frekvencije $\nu = \omega/2\pi$) i talasnog vektora \vec{k} postoje sledeće veze:

$$E = h\nu = h\frac{\omega}{2\pi} = \hbar\omega \quad (8.1.20)$$

gde smo uveli oznaku $\hbar = h/2\pi$. Dalje iz De Brolijeve jednačine i pomoću (D-3.1.6) sledi:

$$|\vec{p}| = \frac{h}{\lambda} = \hbar|\vec{k}|. \quad (8.1.21)$$

Kada se ω iz (8.1.20) i $|\vec{k}|$ (8.1.21) zamene u jednačini ravnog talasa (D-3.1.13) dobija se jednačina De Brolijevog talasa koji označavamo sa ψ i kojim prikazujemo česticu koja se kreće u pravcu x -ose:

$$\psi = \psi_0 e^{i(Et/\hbar - p_x x/\hbar)} = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)}. \quad (8.1.22)$$

U opštem slučaju, za kretanje u anizotropnoj sredini duž proizvoljnog pravca koji sa koordinatnim osama zaklapa uglove α , β i γ , jednačina De Brolijevog talasa glasi:

$$\psi = \psi_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} = \psi_0 e^{i(\omega t - k_x x - k_y y - k_z z)} = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x - p_y y - p_z z)}. \quad (8.1.23)$$

8.2 ČESTICA KAO TALASNI PAKET

DODATAK 8.2

D-8.2.1 Kompleksni brojevi i kompleksne funkcije

Kompleksni broj z sastoji se od realnog dela a i imaginarnog dela ib :

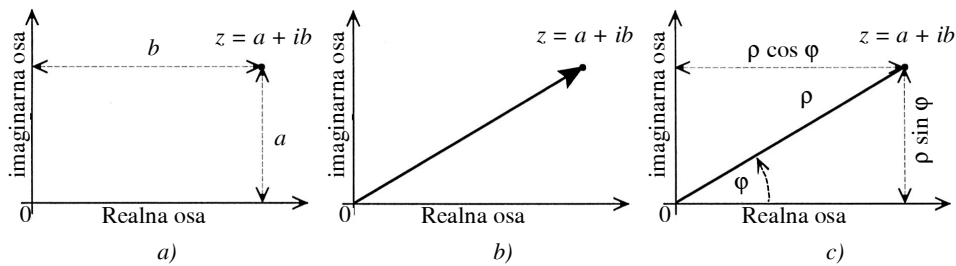
$$z = a + ib$$

gde su a i b realni brojevi, a „ i ” imaginarna jedinica: $i^2 = -1$.

Slično realnom broju koji može da se predstavi tačkom na brojnoj osi, kompleksni broj može da se predstavi tačkom u ravni, Slika D-8.2.1a. Pošto tački može da se pridruži radijus vektor, to i kompleksni broj može da se predstavi vektorom, Slika D-8.2.1b. Ako se umesto u Dekartovim, kompleksni broj predstavi u polarnim koordinatama, Slika D-8.2.1c, onda u trigonometrijskom obliku isti kompleksni broj može da se napiše kao:

$$z = \rho(\cos \varphi + i \sin \varphi)$$

gde je ρ dužina radijus vektora koja se naziva još i moduo, ili apsolutna vrednost vektora, $\rho = |a|$. Ugao φ (u radijanima!) je argument kompleksnog broja. Veza između parametara a , b , ρ i φ ista je kao i između Dekartovih i polarnih koordinata: $a = \rho \sin \varphi$, $b = \rho \cos \varphi$.



Slika D-8.2.1 Predstavljanje kompleksnih brojeva: a) u Dekartovim koordinatama; b) pomoću radijus vektora; c) u polarnim koordinatama.

Korišćenjem Ojlerove formule:

$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi$$

kompleksni broj z može da se predstavi i u eksponencijalnom obliku:

$$z = \rho e^{i\varphi}.$$

I konjugovano kompleksni brojevi mogu da se predstave odgovarajućim oblicima:

$$z = a + ib = \rho(\cos \varphi + i \sin \varphi) = \rho e^{+i\varphi}$$

$$z = a - ib = \rho(\cos \varphi - i \sin \varphi) = \rho e^{-i\varphi}.$$

Na primer, kompleksni broj $1 + i\sqrt{3}$ može da se predstavi u sledećim oblicima:

$$\text{algebarski oblik } 1 + i\sqrt{3} =$$

$$\text{trigonometrijski oblik } = 2\left(\cos \frac{\pi}{3} + i \sin \frac{\pi}{3}\right) =$$

$$\text{ekponencijalni oblik } = 2e^{i\frac{\pi}{3}}.$$

Način na koji se kompleksni broj izražava zavisi od problema koji se rešava. Na primer, eksponencijalni oblik najpogodniji je za nalaženje kvadrata modula kompleksnog broja jer se u tom predstavljanju konjugovano kompleksni brojevi razlikuju samo po znaku argumenta:

$$zz^* = \rho e^{+i\varphi} \rho e^{-i\varphi} = \rho^2.$$

Račun s kompleksnim brojevima može da pojednostavi mnoge probleme i rešenja. Na primer, kružnica, čija je jednačina u Dekartovim koordinatama:

$$\frac{x^2}{r^2} + \frac{y^2}{r^2} = 1$$

u kompleksnom obliku je:

$$z = r e^{it}$$

gde je z kompleksna funkcija, a t realna promenljiva. Iz poslednje jednačine i geometrijskog tumačenja kompleksnog broja vidimo da se kružnica dobija rotacijom radijus vektora čiji je moduo jednak poluprečniku r , gde promenljiva t predstavlja ugao koji radijus vektor zaklapa sa realnom osom. Za $t = 0$, ugao je nula i $z = r$, dakle, z je realan broj. Kada je $t = \pi/2$

$$z = r e^{i\frac{\pi}{2}} = r \left[\cos\left(\frac{\pi}{2}\right) + i \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \right] = ir$$

z je imaginarni broj. Na sličan način može da se nađe da je $z = -r$ za $t = \pi$, odnosno $z = -ir$ za $t = 3\pi/2$. Dakle, množenje imaginarnom jedinicom „ i ” geometrijski predstavlja rotaciju za $\pi/2$ radijana.

D-8. 2. 2 Parnost funkcije

Parnost funkcije izražava njenu simetriju u odnosu na koordinatni početak. Parna funkcija je (ogledalski) simetrična u odnosu na vertikalnu osu:

$$p(x) = p(-x) \quad (\text{D-8.2.1})$$

i zbog toga je njen integral u simetričnom području $(-a, +a)$ dvostruko veći od integrala na polovini tog područja $(0, +a)$:

$$\int_{-a}^{+a} p(x) dx = 2 \int_0^{+a} p(x) dx. \quad (\text{D-8.2.2})$$

Parne funkcije su $\cos x$, $\sin^2 x$, x^2 , $\text{sinc } x$, itd.

Neparna funkcija je antisimetrična, tj. njena leva polovina jednaka je desnoj sa promenjenim znakom:

$$n(x) = -n(-x) \quad (\text{D-8.2.3})$$

i zbog toga je njen integral u simetričnom području jednak nuli:

$$\int_{-a}^{+a} n(x) dx = 0. \quad (\text{D-8.2.4})$$

Očigledno $n(0) = 0$, tj., neparna funkcija mora da prolazi kroz koordinatni početak, dok parna funkcija može, ali ne mora. Neparne funkcije su $\sin x$, $\operatorname{tg} x$, x , x^3 , itd.

Funkcija koja nema simetriju, može da se predstavi kao kombinacija njene parne p_f i neparne n_f komponente:

$$f(x) = p_f(x) + n_f(x)$$

pri čemu je:

$$\begin{aligned} p_f(x) &= \frac{1}{2}[f(x) + f(-x)] \\ n_f(x) &= \frac{1}{2}[f(x) - f(-x)]. \end{aligned} \quad (\text{D-8.2.5})$$

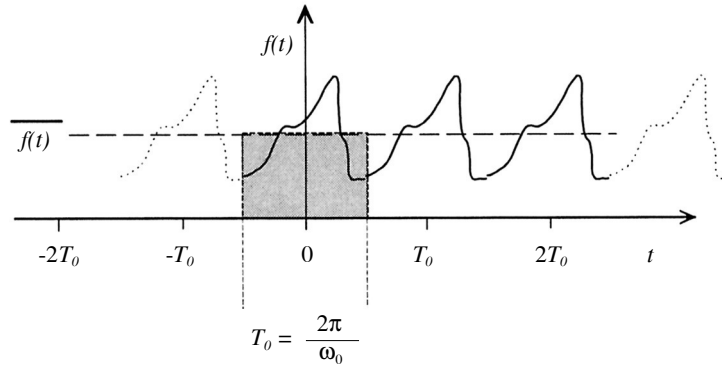
Slično kao kod pozitivnih i negativnih brojeva važi:

$$\begin{aligned} p_1(x)p_2(x) &= p(x) \\ n_1(x)n_2(x) &= p(x) \\ p_1(x)n_2(x) &= n(x). \end{aligned} \quad (\text{D-8.2.6})$$

Prepoznavanje parnosti i razlaganje funkcije na parni i neparni deo vrlo je pogodno pri integraljenju u simetričnom području jer za neparne funkcije integral može da se odredi i bez izračunavanja.

D-8.2.3 Periodične funkcije

Periodična funkcija $f(t)$ ponavlja se sa periodom T_0 (odnosno frekvencijom $\omega_0 = 2\pi/T_0$ u radijanima po jedinici vremena), Slika D-8.2.2.



Slika D-8.2.2 Periodična funkcija i njena srednja vrednost.

Srednju vrednost funkcije $\bar{f}(t)$ nalazimo integraljenjem unutar jednog perioda:

$$\bar{f}(t) = \frac{1}{T_0} \int_{-T_0/2}^{T_0/2} f(t) dt = \frac{\omega_0}{2\pi} \int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} f(t) dt. \quad (\text{D-8.2.7})$$

Srednja vrednost geometrijski predstavlja visinu pravougaonika čija je površina jednaka površini krive u istom području. Srednja vrednost neparne funkcije jednaka je nuli. Međutim, srednja vrednost harmonijskih funkcija ($\sin kx$, $\cos kx$, e^{ikx} , $k = \pm 1, \pm 2, \dots$) u celom broju perioda jednaka je nuli bez obzira na parnost:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} \sin(k\omega_0 t) dt = 0, \quad \int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} \cos(k\omega_0 t) dt = 0, \quad \int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} e^{ik\omega_0 t} dt = 0. \quad (\text{D-8.2.8})$$

D-8.2.4 Nekoliko korisnih integrala

Jednačine (D-8.2.8) ne važe za $k = 0$ jer tada funkcije nisu oscilatorne. Zapravo, (D-8.2.8) uvek važi samo za sinusnu funkciju. Za kosinusnu i eksponencijalnu funkciju (koje za $k=0$ imaju vrednost jednaku jedinici) integral se lako nalazi, recimo za $k = m - n$:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} \cos[(m-n)\omega_0 t] dt = \int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} e^{i(m-n)\omega_0 t} dt = \begin{cases} 0 & \text{za } m \neq n \\ \frac{2\pi}{\omega_0} & \text{za } m = n \end{cases}. \quad (\text{D-8.2.9})$$

Drugi korisni integral je:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} \sin(m\omega_0 t) \sin(n\omega_0 t) dt = \begin{cases} 0 & \text{za } m \neq n \\ \frac{\pi}{\omega_0} & \text{za } m = n \end{cases} \quad (\text{D-8.2.10})$$

$m, n = \pm 1, \pm 2, \dots$

Za $m \neq n$ integral je nula jer je podintegralna funkcija oscilatorna sa celim brojem oscilacija unutar područja u kojem se integriše. Za $m = n$ dobija se funkcija $\sin^2 x$ koja je uvek pozitivna, dakle ima integral veći od nule. Integral funkcije $\sin^2 x$ ne zavisi od frekvencije, već samo od granica integraljenja. Slično tome:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} \cos(m\omega_0 t) \cos(n\omega_0 t) dt = \begin{cases} 0 & \text{za } m \neq n \\ \frac{\pi}{\omega_0} & \text{za } m = n \neq 0 \\ \frac{2\pi}{\omega_0} & \text{za } m = n = 0 \end{cases} \quad (\text{D-8.2.11})$$

$m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

S obzirom na to da je proizvod sinusa i kosinusa neparna funkcija (bez obzira na njihove frekvencije), zaključujemo da je:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} \sin(m\omega_0 t) \cos(n\omega_0 t) dt = 0 \quad (\text{D-8.2.12})$$

$$m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

D-8.2.5 Nekoliko korisnih funkcija

Pravougaona funkcija $\Pi_a(x)$, Slika D-8.2.3a, može da se definiše na sledeći način:

$$\Pi_a(x) = \begin{cases} 0 & \text{za } -\infty < x < -\frac{a}{2} \\ 1 & \text{za } -\frac{a}{2} < x < +\frac{a}{2} \\ 0 & \text{za } \frac{a}{2} < x < \infty. \end{cases}$$

Koristi se za opisivanje veličina koje imaju vrednosti samo u ograničenoj oblasti. Važna, očigledna, veza je:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Pi_a(x) f(x) dx = \int_{-a/2}^{+a/2} f(x) dx. \quad (\text{D-8.2.13})$$

Dirakova δ -funkcija, Slika D-8.2.3b, može grubo da se shvati kao funkcija koja je svuda jednaka nuli osim za $x = 0$ kada ima beskonačnu vrednost, pri čemu važi:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{za } x \neq 0 \\ \infty & \text{za } x = 0 \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (\text{D-8.2.14})$$

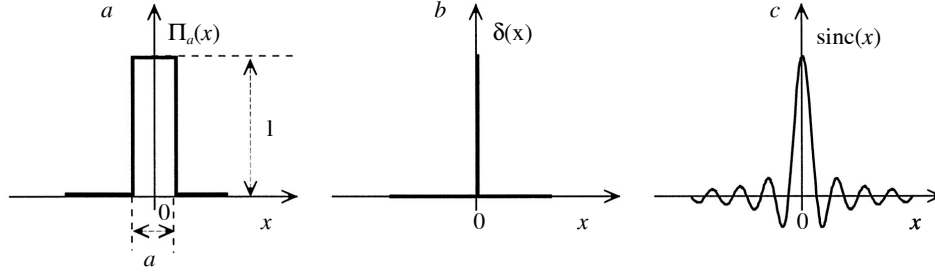
Isto:

$$\delta(x-a) = \begin{cases} 0 & \text{za } x \neq a \\ \infty & \text{za } x = a \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a) f(x) dx = f(a). \quad (\text{D-8.2.15})$$

Funkcija može da se opiše kao granični slučaj nekih uobičajenih funkcija. Na primer, može da se predstavi kao pravougaona funkcija sa beskonačno malom širinom i beskonačno velikom amplitudom:

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\Pi_a(x)}{a}. \quad (\text{D-8.2.16a})$$



Slika D-8.2.3 Tri korisne funkcije: a) pravougaona funkcija; b) Dirakova delta funkcija, i c) sink funkcija.

Slično:

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-ax^2} \quad (\text{D-8.2.16b})$$

$$= \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{a}{2} e^{-a|x|} \quad (\text{D-8.2.16c})$$

$$= \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{a}{\pi(a^2 + x^2)} \quad (\text{D-8.2.16d})$$

$$= \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{\sin ax}{\pi x} \quad (\text{D-8.2.16e})$$

$$= \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-a}^{+a} e^{\pm ixy} dy. \quad (\text{D-8.2.16f})$$

Izraz (D-8.2.16e) zaslu\u017euje komentar. Mada vrednost funkcije te\u017ei beskona\u010dnosti za $x = 0$ i $a \rightarrow \infty$, a njena površina ostaje konstantna i jednaka jedinici, nije sasvim ta\u010dno da je njena vrednost jednaka nuli za $x \neq 0$. Me\u010dutim, kada $a \rightarrow \infty$ vrednost funkcije du\u017e x -ose osciluje sve br\u017ee tako da srednja vrednost na proizvoljno malom odse\u010dku, koji ne uklju\u010duje nulu, te\u017ei nuli. U ve\u010dini slu\u010dajeva to je dovoljno za odgovaraju\u0107i opis delta funkcije. Integral (D-8.2.16f) isto je \u0161to i (D-8.2.16e). Me\u010dutim, kao \u0161to \u0107e se ubrzo videti, on je pogodan za pojednostavlji-vanje integrala. Delta funkcija je pogodna za opisivanje pojava koje su ograni\u010dene u prostoru ili u vremenu, na primer, za opisivanje \u010destice beskona\u010dno malih dimenzija.

Sinc ($\sin x/x$), Slika D-8.2.3c, ima obvojniciu hiperbole i nule kao i sinusna funkcija:

$$\text{sinc } x = \frac{\sin x}{x}; \text{ sinc } 0 = 1; \text{ sinc } k\pi = 0; k = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{D-8.2.17})$$

Ponekad se defini\u0161e i kao $\sin(\pi x)/(\pi x)$. \u010cesto se javlja u fizici kod opisivanja pojava vezanih za talasno kretanje, na primer, difrakcije.

D-8.2.6 Furijeovi redovi

Svaka periodična funkcija $F(t)$ sa periodom T_0 (odnosno frekvencijom $\omega_0 = 2\pi/T_0$ u radijanima po jedinici vremena), Slika D-8.2.2, može da se predstavi beskonačnim zbirom harmonijskih funkcija čija je frekvencija celobrojni umnožak osnovne frekvencije ω_0 :

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(n\omega_0 t) + b_n \sin(n\omega_0 t)] \quad (\text{D-8.2.18a})$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{+in\omega_0 t} \quad (\text{D-8.2.18b})$$

Koeficijenti a_n , b_n , g_n predstavljaju nepoznate amplitude. Glavni problem harmonijske analize svodi se na pronalaženje ovih koeficijenata.

Koeficijenti se dobijaju pomoću sledećih jednačina:

$$a_n = \frac{2}{T_0} \int_{-T_0/2}^{+T_0/2} f(t) \cos(n\omega_0 t) dt = \frac{2}{T_0} \int_0^{+T_0/2} [f(t) + f(-t)] \cos(n\omega_0 t) dt \quad (\text{D-8.2.19})$$

$$b_n = \frac{2}{T_0} \int_{-T_0/2}^{+T_0/2} f(t) \sin(n\omega_0 t) dt = \frac{2}{T_0} \int_0^{+T_0/2} [f(t) - f(-t)] \sin(n\omega_0 t) dt \quad (\text{D-8.2.20})$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

Važno je da uočimo da se izrazima na levoj strani integrali unutar jednog perioda T_0 , a u izrazima na desnoj strani unutar polovine perioda. Izrazi na desnoj strani napisani su po ugledu na (D-8.2.5), da bismo ukazali na vrlo važnu činjenicu da za neparnu funkciju koeficijenti a_n iščezavaju [jer je za neparnu funkciju $f(t) + f(-t) = 0$, (D-8.2.3)], a za parnu da iščezavaju koeficijenti b_n [za parnu funkciju je $f(t) - f(-t) = 0$, (D-8.2.1)]. U eksponencijalnom obliku koeficijenti se nalaze iz izraza:

$$g_n = \frac{1}{T_0} \int_{-T_0/2}^{T_0/2} f(t) e^{-in\omega_0 t} dt = \frac{\omega_0}{2\pi} \int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} f(t) e^{-in\omega_0 t} dt \quad (\text{D-8.2.21})$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

pri čemu je veza između koeficijenata g_n , a_n i b_n :

$$g_n = \begin{cases} \frac{1}{2}(a_n - ib_n) & \text{za } n > 0 \\ a_0 & \text{za } n = 0 \\ \frac{1}{2}(a_n + ib_n) & \text{za } n < 0 \end{cases} \quad (\text{D-8.2.22})$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Veza (D-8.2.21) se lako proverava. Polazeći od eksponencijalnog oblika Furijeovog reda, množenjem izraza (D-8.2.18b) sa $e^{im\omega_0 t}$ i integraljenjem, **unutar jednog perioda** ($T_0 = 2\pi/\omega_0$):

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} f(t) e^{-im\omega_0 t} dt = \int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{+i(n-m)\omega_0 t} \right) dt$$

a zatim zamenom redosleda integraljenja i sabiranja:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} f(t) e^{-im\omega_0 t} dt = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} g_n e^{+i(n-m)\omega_0 t} dt \right)$$

uzimajući u obzir jednačinu (D-8.2.9) (koja pokazuje da integrali za $m \neq n$ iščezavaju), nalazimo:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} f(t) e^{-im\omega_0 t} dt = g_m \frac{2\pi}{\omega_0}$$

odakle se preuređivanjem dobija izraz (D-8.2.21). Slično ovome, za Furijeov red izražen preko sinusnih i kosinusnih članova, množenjem izraza (D-8.2.18a) sa $\cos m\omega_0 t$ i integraljenjem unutar jednog perioda, nalazimo:

$$\begin{aligned} \int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} f(t) \cos(m\omega_0 t) dt &= + \frac{a_0}{2} \int_{-\pi/\omega_0}^{+\pi/\omega_0} \cos(m\omega_0 t) dt \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} \cos(m\omega_0 t) \cos(n\omega_0 t) dt \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} b_n \int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} \cos(m\omega_0 t) \sin(n\omega_0 t) dt. \end{aligned} \quad (\text{D-8.2.23})$$

Prvi član s desne strane predstavlja srednju vrednost kosinusne funkcije koja je jednaka nuli za svako m osim za $m = 0$, kada iznosi $a_0\pi/2$, jednačina (D-8.2.7). Treći član iščezava prema (D-8.2.4), jer je podintegralna funkcija neparna, jednačina (D-8.2.6). Najzad, drugi član ima vrednost različitu od nule samo za $m = n$, $a_0\pi/2$, prema (D-8.2.11). Dakle (D-8.2.23) se svodi na sledeći izraz:

$$\int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} \cos(m\omega_0 t) dt = a_m \frac{\pi}{\omega_0}$$

$m = 0, 1, 2, \dots$

iz kojeg prostim preuređivanjem nalazimo (D-8.2.19). Slično tome, za sinusne članove, polazeći od (D-8.2.18a) imamo:

$$\begin{aligned} \int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} f(t) \sin(m\omega_0 t) dt &= +a_m \int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} \sin(m\omega_0 t) dt \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} \sin(m\omega_0 t) \cos(n\omega_0 t) dt \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} b_n \int_{-\pi/\omega_0}^{\pi/\omega_0} \sin(m\omega_0 t) \sin(n\omega_0 t) dt . \end{aligned}$$

Prva dva izraza jednaka su nuli prema (D-8.2.4) (podintegralne funkcije neparne), dok iz poslednjeg izraza, saglasno jednačini (D-8.2.10), preostaje samo član za $m = n$, kada integral iznosi π/ω_0 . Najzad, preuređivanjem dobijamo izraz (D-8.2.20).

Da bi izvedene jednačine važile, funkcija $f(t)$ mora:

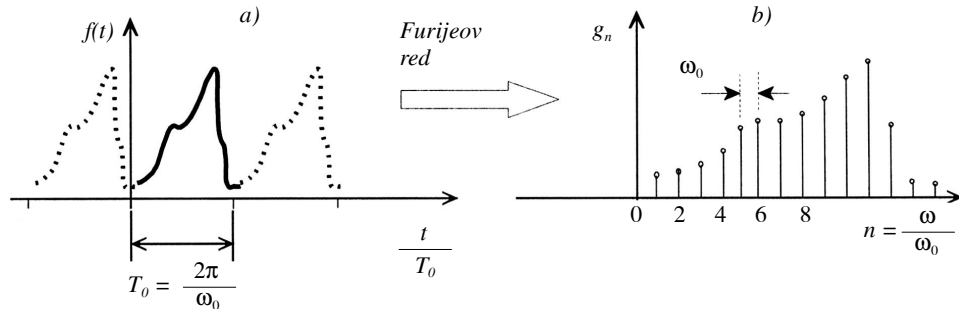
da se proteže od $t = -\infty$ do $t = +\infty$;

da bude periodično sa periodom T_0 ;

da bude jednoznačna;

i da bude konačna u celom intervalu definisanosti.

Pri tome, funkcija može da bude kompleksna, a sme da ima i tačke prekida. Dakle, svaka periodična funkcija koja ispunjava pomenute uslove, može da se izrazi preko beskonačnog zbira harmonijskih funkcija sa frekvencijama koje su celobrojni umnošci osnovne frekvencije ω_0 , Slika D-8.2.4. Pošto između prvobitne funkcije $f(t)$ i njenih Furijeovih koeficijenata postoji jednoznačna veza, jednačine (D-8.2.18), za potpuni opis sasvim je svedeno da li je poznata funkcija ili njeni Furijeovi koeficijenti. U koeficijentima su sadržani svi podaci o prvobitnoj funkciji, samo što su upakovani na malo drukčiji način, Slika D-8.2.4b. Na primer, ako se funkcijom $f(t)$ izražava promena amplitude tokom vremena, tada Furijeovi koeficijenti daju intenzitete oscilacija na odgovarajućim frekvencijama. Izbor domena u kome se pojava posmatra [u vremenskom domenu preko funkcije $f(t)$ ili u frekventnom domenu preko Furijeovih koeficijenata] zavisi samo od pogodnosti.

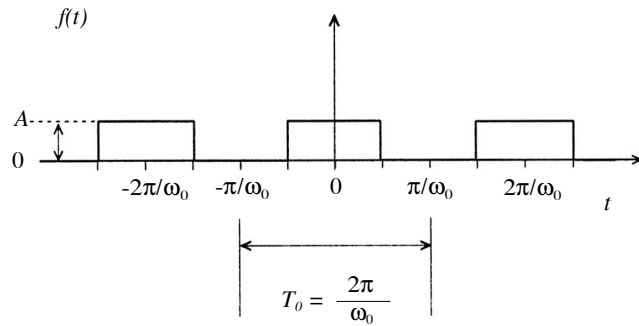


Slika D-8.2.4 Periodična pojava sa periodom T_0 , na ekvivalentan način može da se opiše: a) preko promene amplitude oscilacija sa vremenom; ili b) preko amplituda na različitim frekvencijama. Pri tome se veza između amplitude $f(t)$ i koeficijenata g_n , dobija iz razvoja funkcije u Furijeov red.

Primer: Posmatrajmo periodični niz pravougaonih pulseva, Slika D-8.2.5, koji može da se predstavi izrazom:

$$f(t) = \begin{cases} A & \text{za } |t| \leq \left(k \pm \frac{1}{4}\right) T_0 \\ 0 & \text{za } |t| \leq \left[\frac{1}{2}(k+1) \pm \frac{1}{4}\right] T_0 \end{cases} . \quad (\text{D-8.2.24})$$

Ako uočimo da je funkcija parna, nema potrebe da računamo koeficijente b_n pošto su svi jednaki nuli.



Slika D-8.2.5 Periodični niz pravougaonih impulsa prema (D-8.2.24).

Potražimo li koeficijente a_n , prema izrazu (D-8.2.19), uz zamenu granice integraljenja prema izrazu (D-8.2.13), imamo:

$$a_n = \frac{\omega_0}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2\omega_0}}^{+\frac{\pi}{2\omega_0}} A \cos(n\omega_0 t) dt$$

odakle neposrednim integraljenjem nalazimo:

$$a_n = A \frac{\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)}{\frac{n\pi}{2}} = A \operatorname{sinc}\left(\frac{n\pi}{2}\right) \quad (\text{D-8.2.25})$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

Dakle:

$$f(t) = \frac{A}{2} + A \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{sinc}\left(\frac{n\pi}{2}\right) \cos(n\omega_0 t) \quad (\text{D-8.2.26})$$

$$f(t) = \frac{A}{2} + \frac{2A}{\pi} \left[\cos \omega_0 t - \frac{\cos 3\omega_0 t}{3} + \frac{\cos 5\omega_0 t}{5} - \dots \right].$$

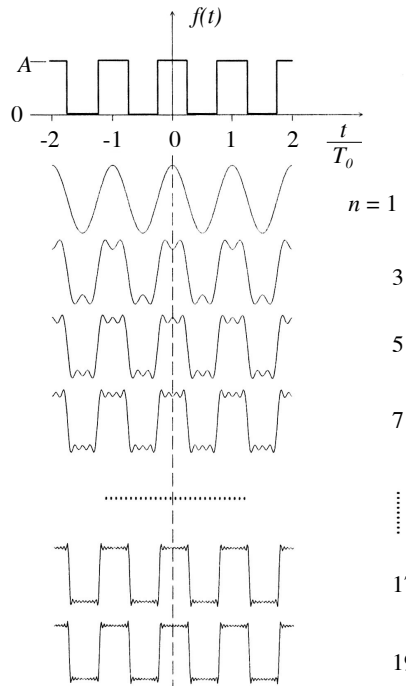
Saglasno izrazu (D-8.2.22):

$$g_n = \frac{A}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \text{ i } g_0 = \frac{A}{2}$$

što zamenom prema (D-8.2.18b) daje:

$$f(t) = \frac{A}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sin c\left(\frac{n\pi}{2}\right) e^{in\omega_0 t}.$$

Slika D-8.2.6 pokazuje funkciju $f(t)$ prema izrazu (D-8.2.24) i njeno razvijanje u Furijeov red prema (D-8.2.26). Očigledno je da se Furijeov red približava funkciji sa porastom broja članova.

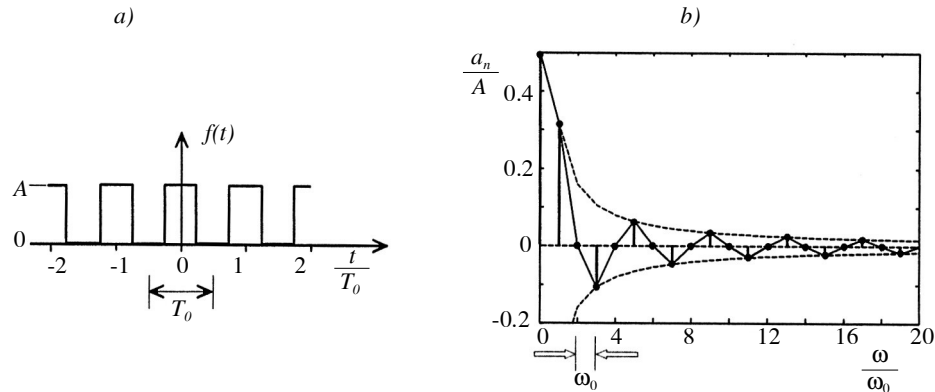


Slika D-8.2.6 Periodična funkcija i njeno razvijanje u Furijeov red. Brojevi s desne strane pokazuju broj članova Furijeovog reda.

Drugi, često mnogo pogodniji način da se ista pojava opiše, jeste da se umesto funkcije posmatraju njeni Furijeovi koeficijenti. Za određeni primer Furijeovi koeficijenti su dati sink funkcijom:

$$(D-8.2.24) \quad f(t) = \begin{cases} A \text{ za } |t| \leq \left(k \pm \frac{1}{4}\right) T_0 & a_n = A \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \\ 0 \text{ za } |t| \leq \left[\frac{1}{2}(k+1) \pm \frac{1}{4}\right] T_0 & b_n = 0. \end{cases}$$

Slika D-8.2.7 pokazuje vezu između prvobitne funkcije (D-8.2.24) i njenih Furijeovih koeficijenata (D-8.2.25). Kao što u vremenskom domenu t , pojavu opisuje amplituda oscilovanja $f(t)$, tako i Furijeovi koeficijenti a_n opisuju istu pojavu u frekventnom domenu ω preko intenziteta na pojedinim harmonicima, $n\omega_0$. Drugim rečima, Furijeovi koeficijenti predstavljaju spektar periodične funkcije.



Slika D-8.2.7 Periodična funkcija i njen spektar: a) prema jednačini (D-8.2.24); b) prema jednačini (D-8.2.25).

Treba da se uoči da između osnovnih jedinica u vremenskom domenu T_0 i u frekventnom domenu ω_0 , postoji veza $\omega_0 T_0 = 2\pi$.

D-8.2.7 Furijeova transformacija

Na potpuno ekvivalentan način kao kod razvijanja periodične funkcije u Furijeov red, Furijeova transformacija može da se smatra razvijanjem aperiodične funkcije u njen spektar. Jedina, ali vrlo bitna, razlika jeste u tome što periodična funkcija ima diskretni spektar, dok je spektar aperiodične funkcije neprekidan. To je jasno iz definicije perioda i frekvencije. Periodična funkcija sa periodom T_0 ima osnovnu frekvenciju ω_0 ($\omega_0 = 2\pi/T_0$) i harmonike u Furijeovom razvoju sa frekvencijama $n\omega_0$, dok kod aperiodične funkcije period neograničeno raste, $T_0 \rightarrow \infty$, i zbog toga osnovna frekvencija teži nuli. $\omega_0 \rightarrow 0$! Isto tako i razmak između harmonika teži nuli, dakle, spektar postaje neprekidan. Između Furijeovih redova i Furijeove transformacije postoji potpuna ekvivalencija:

Periodična funkcija	Furijeov red	Diskretni spektar
$f(t) = f(t + T_0)$	\Rightarrow	$n\omega_0,$
		a_n
Aperiodična funkcija	Furijeova transformacija	Neprekidni spektar
$f(t) = f(t + T_0), T_0 \rightarrow \infty$	\Rightarrow	$n\omega_0 \rightarrow \omega$
		$a_n \rightarrow G(\omega)$

$$\text{Furijevov red} \Rightarrow \left[\begin{array}{ccc} T_0 \rightarrow \infty \\ \omega_0 \rightarrow 0 \\ n\omega_0 \rightarrow \omega \\ \sum_{-\infty}^{\infty} \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \\ \int_{\frac{T_0}{2}}^{\frac{T_0}{2}} \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \end{array} \right] \Rightarrow \text{Furijeova transformacija}.$$

Furijeova transformacija lako može da se izvede preko Furijevih redova. Kao što kod periodične funkcije koeficijenti a_n , b_n ili g_n predstavljaju amplitude oscilacija na diskretnim frekvencijama $n\omega_0$, tako funkcije $A(\omega)$, $B(\omega)$ ili $G(\omega)$ kod aperiodične funkcije predstavljaju amplitude oscilacije na frekvencijama ω iz neprekidnog spektra. Tačnije, funkcije $A(\omega)$, $B(\omega)$ ili $G(\omega)$, predstavljaju amplitude oscilacija u jediničnom frekventnom opsegu u okolini frekvencije ω . Slično tome, koeficijenti a_n , b_n ili g_n predstavljaju amplitude oscilovanja po jediničnom frekventnom opsegu u okolini frekvencije $n\omega_0$. Pošto je u diskretnom spektru jedinični opseg jednak osnovnoj frekvenciji, to važi:

$$\frac{A(\omega)}{d\omega} = \frac{a_n}{\Delta\omega}$$

$$\frac{A(\omega)}{1} = \frac{a_n}{\omega_0}$$

odnosno:

$$A(\omega) = \frac{a_n}{\omega_0}. \quad (\text{D-8.2.27})$$

Polazeći od Furijevih koeficijenata (D-8.2.19), a koristeći zamenu:

$$\int_{-\frac{\pi}{\omega_0}}^{\frac{\pi}{\omega_0}} \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty}$$

i:

$$n\omega_0 = \omega$$

nalazimo:

$$A(\omega) = \frac{a_n}{\omega_0} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos(\omega t) dt.$$

Na sličan način:

$$B(\omega) = \frac{b_n}{\omega_0} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \sin(\omega t) dt.$$

Dakle, Furijeov red periodične funkcije $f(t)$:

$$(D-8.2.18a) \quad f(t) = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n \cos(n\omega_0 t) + b_n \sin(n\omega_0 t)]$$

kada funkcija postaje aperiodična, prelazi u Furijeovu transformaciju:

$$f(t) = \int_0^{\infty} [A(\omega) \cos \omega t + B(\omega) \sin \omega t] d\omega. \quad (D-8.2.28)$$

Veličina predstavljena u vremenskom domenu funkcijom $f(t)$ može da se *ekvivalentno* predstavi u frekventnom domenu koeficijentima $A(\omega)$ i $B(\omega)$; $f(t)$ i koeficijenti $A(\omega)$ i $B(\omega)$ povezani su Furijeovom transformacijom, kao što su povezane periodične funkcije i njihovi Furijeovi koeficijenti.

Slično Furijeovim redovima, Furijeova transformacija može da se izrazi na nekoliko različitih (ekvivalentnih) načina:

$$f(t) = \int_0^{\infty} [A(\omega) \cos \omega t + B(\omega) \sin(\omega t)] d\omega \quad (D-8.2.29)$$

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} E(\omega) e^{+i\omega t} d\omega \quad (D-8.2.30)$$

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{+i\omega t} d\omega \quad (D-8.2.31)$$

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\nu) e^{+i2\pi\nu t} d\nu \quad (D-8.2.32)$$

$$(\omega = 2\pi\nu)$$

gde su funkcije $A(\omega)$, $B(\omega)$, $E(\omega)$, $F(\omega)$, $G(\omega/2\pi)$ međusobno povezane relacijama:

$$A(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos(\omega t) dt = \frac{1}{2\pi} [F(\omega) + F(-\omega)] \quad (D-8.2.33)$$

$$B(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \sin(\omega t) dt = \frac{i}{2\pi} [F(\omega) - F(-\omega)] \quad (D-8.2.34)$$

$$E(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} G\left(\frac{\omega}{2\pi}\right) \quad (\text{D-8.2.35})$$

$$\begin{aligned} F(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt = \pi[A(\omega) - iB(\omega)] \quad \omega > 0 \\ &= \pi[A(|\omega|) + iB(|\omega|)] \quad \omega < 0. \end{aligned} \quad (\text{D-8.2.36})$$

Na potpuno isti način kao kod Furijeovih redova, izraz na desnoj strani jednačina (D-8.2.33) i (D-8.2.34) pokazuju da je za neparnu funkciju $A(\omega) = 0$, a za parnu funkciju $B(\omega) = 0$.

Ako uporedimo izraz (D-8.2.29) i (D-8.2.35), možemo da uočimo vrlo važnu simetriju:

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} E(\omega) e^{+i\omega t} d\omega \quad (\text{D-8.2.37a})$$

$$E(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt. \quad (\text{D-8.2.37b})$$

Funkcije $f(t)$ i $E(\omega)$ slede jedna iz druge na vrlo sličan način, pa može da se kaže da ako je $f(t)$ Furijeova transformacija od $E(\omega)$, tada je $E(\omega)$ inverzna Furijeova transformacija funkcije $f(t)$. Ukratko, $f(t)$ i $E(\omega)$ formiraju Furijeov transformacioni par. Jedina razlika u izrazima (D-8.2.37) ogleda se u promeni znaka u eksponencijalnom članu. Pri tome, sasvim je svejedno koji se od izraza smatra neposrednom transformacijom, pa još konciznije može da se napiše:

$$\begin{aligned} f(t) &= \text{FT}\{E(\omega)\} \\ E(\omega) &= \text{FT}^{-1}\{f(t)\} \\ f(t) &\stackrel{FT}{\Leftrightarrow} E(\omega). \end{aligned}$$

Veze (D-8.2.37) lako možemo da dokažemo:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega' t} dt = \int_{-\infty}^{\infty} E(\omega) \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{+i(\omega - \omega') t} dt \right] d\omega \quad (\text{D-8.2.38a})$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} E(\omega) \delta(\omega - \omega') d\omega \quad (\text{D-8.2.38b})$$

$$= E(\omega'). \quad (\text{D-8.2.38c})$$

Izraz (D-8.2.38a) smo dobili množenjem obe strane jednačine (D-8.2.37a) sa $e^{-i\omega' t} / \sqrt{(2\pi)}$ i integraljenjem po t ; izraz u uglastoj zagradi na desnoj strani (D-8.2.38a) predstavlja integralni oblik delta funkcije (D-8.2.16f), čijom zamenom dobijamo (D-8.2.38b). Na kraju, integra-

ljenjem, prema (D-8.2.15), nalazimo (D-8.2.38c). Zamenom promenljivih, $\omega' \rightarrow \omega$, nalazimo da smo, polazeći od (D-8.2.38a), poznatim transformacijama stigli do (D-8.2.38b), dakle, dva izraza su ekvivalentna.

Primer: Potražimo Furijeovu transformaciju pravougaone impulsne funkcije, Slika D-8.2.8:

$$f(t) = \begin{cases} A & \text{za } |t| \leq L \\ 0 & \text{za } |t| > L \end{cases} \quad (\text{D-8.2.39})$$

Pošto je funkcija parna $B(\omega) = 0$, a $A(\omega)$, zamenom u izrazu (D-8.2.33) nalazimo:

$$A(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos \omega t dt = \frac{1}{\pi} \int_{-L}^{+L} A \cos \omega t dt = \frac{A}{\pi \omega} \int_{-L}^{+L} \cos \omega t d(\omega t)$$

odakle neposredno dobijamo:

$$A(\omega) = \frac{A}{\pi \omega} \sin(\omega t) \Big|_{t=-L}^{+L} = \frac{A}{\pi} \omega [\sin(\omega L) - \sin(-\omega L)] \quad (\text{D-8.2.40a})$$

$$= \frac{2A}{\pi \omega} \sin(\omega L) = \frac{2AL}{\pi} \text{sinc}(\omega L)$$

ili s obzirom na (8.2.36):

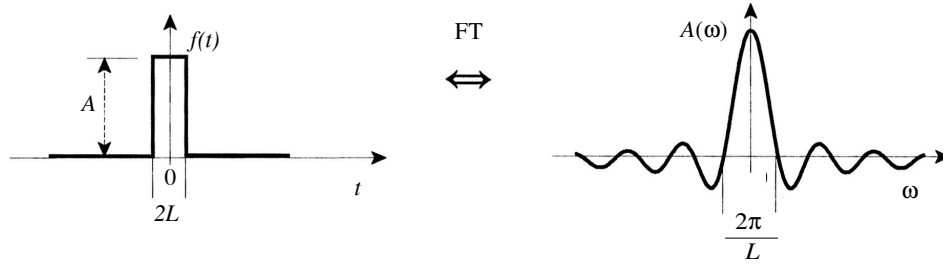
$$F(\omega) = 2AL \text{sinc}(\omega L). \quad (\text{D-8.2.40b})$$

Dakle, Furijeova transformacija pravougaone impulsne funkcije je sink funkcija, kao što je šematski prikazano na Slici D-8.2.8:

$$f(t) = \Pi_{2L}(x) = \begin{cases} A & \text{za } |t| \leq L \\ 0 & \text{za } |t| > L \end{cases} \quad A(\omega) = 2A \frac{\sin(L\omega)}{\omega}.$$

Na Slici D-8.2.9 prikazana je Furijeova transformacija na primeru pravougaone i sink funkcije. Furijeova transformacija funkcije može da se shvati kao zbir (predstavljen integralom) oscilacija (koje su predstavljene sinusnim, kosinusnim ili eksponencijalnim delom podintegralne funkcije) s odgovarajućim težinama (koje su predstavljene funkcijom koja se transformiše). Dakle, za kosinusnu transformaciju funkcije $E(\omega)$, serija kosinusnih članova $\cos(\omega t)$ sa različitim frekvencijama ω množi se odgovarajućim koeficijentima $E(\omega)$, $E(\omega) \cos(\omega t)$ i sabira se (integrali), što daje funkciju $f(t)$, jednačina (D-8.2.37a). Ako je $E(\omega) = \Pi_L(\omega)$, Slika D-8.2.9a, tada zbir oscilacija $\Pi_L(\omega) \cos(\omega t)$ daje funkciju $\text{sinc}(t)$, Slika D-8.2.9a (gore). Važi i obrnuto, ako je $E(\omega) = \text{sinc}(\omega)$, Slika D-8.2.9c, tada zbir oscilacija $\text{sinc}(\omega) \cos(\omega t)$ daje funkciju $\Pi(t)$, Slika D-8.2.9c (gore).

Najvažnija osobina Furijeove transformacije jeste da fizičku pojavu opisanu u jednom skupu koordinata r (vreme, prostor, energija, impuls, itd.) može da opiše na odgovarajući način u drugom skupu koordinata s , pri čemu su koordinate r i s povezane jednačinom:



Slika D-8.2.8 Pravougaona impulsna funkcija (D-8.2.39) i njena Furijeova transformacija (D-8.2.40). Zbog reverzibilnosti, može da se smatra i obrnuto, da je pravougaona impulsna funkcija Furijeova transformacija sink funkcije. Zapravo, pravougaona impulsna funkcija i sink funkcija obrazuju Furijeov transformacioni par. Treba da se uoči to da je proizvod iz širina (ma kako one bile definisane) transformacionog para konstanta, u ovom slučaju $2L \times 2\pi/L = 4\pi$. Dakle, ako se jedna funkcija širi, druga se sužava.

$$r_0 s_0 = \text{const.} \quad (\text{D-8.2.41})$$

gde su indeksom nula označeni odgovarajući jedinični vektori. Na primer, ako se oscilovanje sistema u vremenskom domenu t predstavlja funkcijom $f(t)$, tada se iste oscilacije u frekventnom domenu ω , opisuju funkcijom $E(\omega)$, pri čemu između funkcija važe veze (D-8.2.37), a između koordinata:

$$\omega_0 t_0 = 2\pi \quad (\text{D-8.2.42})$$

gde je ω_0 jedinična frekvencija, a t_0 jedinični period.

Ako uzmemo u obzir Plankovu jednačinu za energiju oscilatora ($\Delta \epsilon_0 = \hbar \omega_0$) množenjem izraza (D8.2.42) Plankovom konstantom \hbar nalazimo da je:

$$(\Delta \epsilon_0) t_0 = h. \quad (\text{D-8.2.43})$$

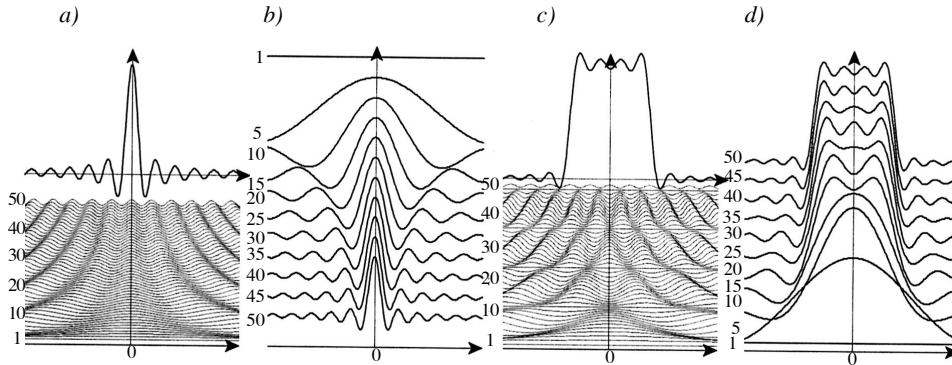
Kao što se za opis oscilatornog kretanja koriste vreme i fekvencija, tako se za prostiranje talasa u prostoru koriste talasna dužina λ i talasni vektor k . Talasne dužine mere se i izražavaju u jedinicama dužine, dok se talasni vektor izražava u recipročnim jedinicama dužine. Talasna dužina je parametar stvarnog prostora, a talasni vektor recipročnog prostora. Prelaz iz opisa preko talasne dužine (stvarnog prostora) u opis preko talasnih vektora (recipročni prostor) izvodi se Furijeovom transformacijom. Na potpuno isti način kao kod jednačine (D-8.2.42), imamo:

$$x_0 k_0 = 2\pi \quad (\text{D-8.2.44})$$

odnosno, s obzirom na to da je $k=2\pi/\lambda$:

$$x_0 \frac{1}{\lambda_0} = 1. \quad (\text{D-8.2.45})$$

Imajući na umu De Brolijevu jednačinu koja povezuje impuls čestice p sa njenom talasnom dužinom, λ , $p = h/\lambda$, množenjem izraza (D-8.2.45) Plankovom konstantom nalazimo:

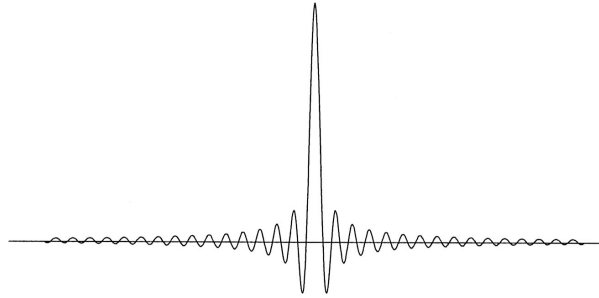


Slika D-8.2.9 Furijeova transformacija može da se shvati kao razlaganje neperiodične funkcije na njen (neprekidan) spektar. U jednačini (D-8.2.37a) integralom je predstavljeno sabiranje komponenta funkcije $E(\omega)$ po neprekidno rastućim frekvencijama ω . Eksponencijalni član (sinusni ili kosinusni, svedeno je) koji se još naziva i jezgro transformacije, predstavlja oscilacije na datoj frekvenciji, a funkcija ispred njega predstavlja njihovu amplitudu. Sabiranjem oscilacija na svim frekvencijama s odgovarajućim amplitudama (integraljenjem), dobija se funkcija čiji je spektar $E(\omega)$: a) sabiranjem kosinusnih talasa iste amplitude sa neprekidno rastućom frekvencijom u ograničenom opsegu $(-\omega_1, \omega_1)$, dakle $E(\omega) = \Pi(\omega)$ dobija se sinc funkcija (gore), dakle $f(t) = \text{sinc}(t)$; b) parcijalne sume kosinusnih funkcija. Sa porastom broja članova raste širina Π -funkcije zbog čega opada širina sinc funkcije; c) kao pod a), s tim što su amplitude oscilacija modulirane (pomnožene) sinc funkcijom, dakle, $E(\omega) = \text{sinc}(\omega)$. Zbir oscilacija (gore) konvergira ka Π -funkciji, dakle $f(t) = \Pi(t)$; d) parcijalne sume funkcija sa slike c). Sa porastom broja članova suma se približava Π -funkciji. Dakle, spektar Π -funkcije je sinc funkcija i obrnuto.

$$x_0 p_0 = h. \quad (\text{D-8.2.46})$$

Nije stvar matematike da jediničnim vektorima $\Delta \epsilon_0$, t_0 , x_0 , p_0 daje fizičko značenje, ali treba uočiti da se u izrazima (D-8.2.43) i (D-8.2.46) krije Hajzenbergova relacija neodređenosti. Dakle Hajzenbergova relacija neodređenosti odnosi se na fizičke veličine koje se izražavaju u koordinatama čiji odnos može matematički da se izrazi Furijeovom transformacijom.

Kao što smo videli u prethodnom odeljku, kretanje čestice može da se izrazi ravanskim talasom koji nije prostorno ograničen. Međutim, u najvećem broju eksperimenata elektroni, protoni, jezgra atoma, itd. mogu da se otkriju u određenom delu prostora. Zbog toga, opisivanje čestice ravnim talasom tipa (8.1.23) nije odgovarajuće. Poput čestice, i talasna funkcija koja česticu opisuje, treba da bude lokalizovana. Lokalizovani talas se konstruiše superpozicijom velikog broja talasa čije se talasne dužine prostiru u izvesnom intervalu u okolini De Brogljeve talasne dužine. Dakle, umesto jednog talasa, česticu predstavljamo skupom talasa – talasnim paketom. Talasni paket formiramo takvim slaganjem De Brogljevih talasa da amplituda rezultujućeg talasa bude zanemarljivo mala svuda osim u delu prostora koji odgovara dimenzijama čestice. Pokazaćemo kako se dobija jednodimenzioni talasni paket. Sabiraćemo talase jednakih amplituda, a sa talasnim vektorima koji se menjaju u uskom opsegu $k - \Delta k \leq k \leq k + \Delta k$, Slika 8.2.1.



Slika 8.2.1 Čestica predstavljena kao talasni paket.

Ako su talasni brojevi (intenziteti talasnih vektora) komponentnih talasa vrlo bliski, rezultujući talas umesto zbirom možemo da predstavimo integralom:

$$\Psi(x,t) = \sum_j \Psi_0 e^{i(k_j x - \omega_j t)} \Rightarrow \Psi(x,t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \Psi_0 e^{i(kx - \omega t)} dk . \quad (8.2.1)$$

Pretpostavljajući da su amplitude pojedinih talasa jednake, Ψ_0 možemo kao konstantu da izvučemo ispred integrala. Ugaonu frekvenciju ω , koja je funkcija intenziteta talasnog vektora, razvićemo u Tejlrov red oko vrednosti $k = k_0$ i zadržaćemo samo prvi član razvoja. To je dovoljno dobra aproksimacija ako se uzme u obzir da se talasni vektor menja samo u uskom intervalu oko k_0 :

$$\omega = \omega_0 + \omega'(k - k_0) \quad (8.2.2a)$$

gde je ω' prvi izvod frekvencije po vremenu:

$$\omega' = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0} . \quad (8.2.2b)$$

Zamenom u (8.2.1) sledi:

$$\Psi(x,t) = \Psi_0 \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i\{kx - [\omega_0 + \omega'(k - k_0)]t\}} dk \quad (8.2.3)$$

a uvođenjem smene $\xi = k - k_0$

$$\Psi(x,t) = \Psi_0 e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i(x - \omega' t)\xi} d\xi = A(x,t) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \quad (8.2.4)$$

gde smo sa $A(x,t)$ označili promenljivu amplitudu talasnog paketa:

$$A(x,t) = \psi_0 \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i(x-\omega't)\xi} d\xi. \quad (8.2.5)$$

Podintegralna funkcija, prema Ojlerovoj formuli, može da se razloži na sinusnu i kosinusnu komponentu:

$$e^{i(x-\omega't)\xi} = \cos[(x-\omega't)\xi] + i \sin[(x-\omega't)\xi].$$

Pošto je sinusna funkcija neparna, njen integral u simetričnom intervalu iščezava (D-8.2.4), pa je dovoljno integraliti realni (kosinusni) deo:

$$A(x,t) = \psi_0 \int_{-\Delta k}^{\Delta k} \cos(x-\omega't)\xi d\xi = 2\psi_0 \frac{\sin[(x-\omega't)\Delta k]}{x-\omega't}.$$

Dalje, ako pomnožimo i brojilac i imenilac dobijenog izraza sa Δk , dobijamo:

$$A = 2\psi_0 \Delta k \frac{\sin[(x-\omega't)\Delta k]}{(x-\omega't)\Delta k}. \quad (8.2.6)$$

Uvođenjem smene:

$$(x-\omega't)\Delta k = \eta \quad (8.2.7)$$

izraz (8.2.6) postaje:

$$A = 2\psi_0 \Delta k \frac{\sin \eta}{\eta} = \text{sinc} \eta. \quad (8.2.8)$$

Ovu funkciju smo već analizirali u odeljku D-8.2.4. Iako, strogo uzevši, nije potpuno lokalizovana, sinc funkcija je dobra aproksimacija talasnog paketa jer se 95% talasnog paketa nalazi unutar opsega definisanog prvim nulama, $-\pi \leq \eta \leq +\pi$, Slika 8.2.2.

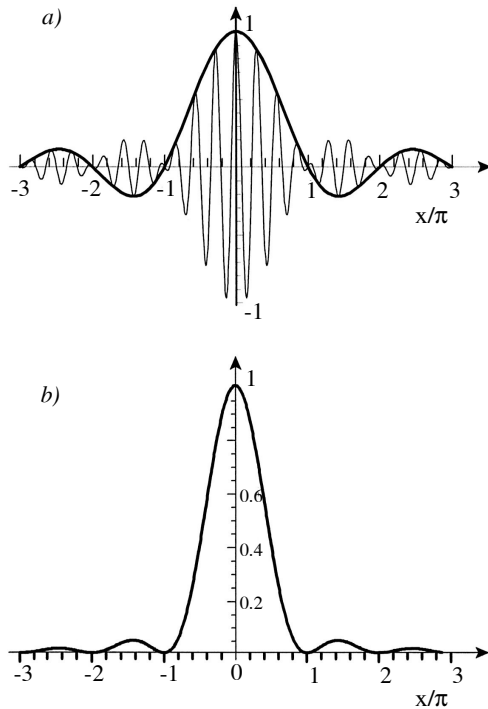
Dakle, talasni paket može da se predstavi amplitudno modulisanim harmonijskim talasom (8.2.4), čiji je realni deo:

$$\text{Re}[\psi(x,t)] = 2\psi_0 \Delta k \text{sinc}[(x-\omega't)\Delta k] \cos(k_0 x - \omega_0 t) \quad (8.2.9)$$

a kvadrat:

$$\psi(x,t)\psi(x,t)^* = 4\psi_0^2 \Delta k^2 \text{sinc}^2[(x-\omega't)\Delta k]. \quad (8.2.9a)$$

U jednačini (8.2.9) možemo da prepoznamo dve komponente talasnog paketa, kosinusnu koja predstavlja noseći talas i sinc komponentu koja pokazuje njegovu modulaciju, Slika 8.2.2a. Kada se kompleksna ψ funkcija digne na kvadrat, brzo oscilujući kosinusni deo se gubi i funkcija postaje jednaka kvadratu amplitude, Slika 8.2.2b.



Slika 8.2.2 Talasni paket: a) realni deo talasne funkcije $\Psi(x,t)$, (8.2.9). Deo koji brzo osciluje potiče od komponente $\cos(kx - \omega t)$ na konstantnom vremenu t . Obvojnica predstavlja amplitudu A (8.2.6) uz $\Delta k = 1$. Deo koji brzo osciluje nosi podatke samo o fazi talasa i stoga se prostire faznom brzinom, v_f . Obvojnica nosi podatke o položaju čestice i kreće se grupnom brzinom, v_g ; b) kvadrat talasnog paketa, $\Psi\Psi^*$ (8.2.9a) jednak je kvadratu obvojnice i opisuje verovatnoću da se čestica nađe na koordinati x . U intervalu $x \in (-\pi, \pi)$ nalazi se preko 95% površine krive.

Pri prostiranju talasnog paketa nije obavezno da se obvojnica kreće istom brzinom kao i sam noseći talas i stoga je potrebno definisati njihove brzine. Fazna brzina se dobija iz jednačine (8.2.9) izjednačavanjem argumenta kosinusne funkcije sa konstantom. Time je definisana tačka na talasu koja ima konstantnu fazu. Brzina kojom se tačka sa proizvoljno odabranom fazom kreće u prostoru predstavlja faznu brzinu. Ako za vrednost konstante izaberemo nulu, tada je $\cos 0 = 1$ i tada posmatramo brzinu kojom se kreće neki od maksimuma nosećeg talasa:

$$\omega_0 t - k_0 x = \text{const.} = 0 \Rightarrow x = \frac{\omega_0}{k_0} t + \text{const}'. \quad (8.2.10)$$

Iz dobijenog izraza, brzinu pomeranja ekvifazne ravni, odnosno faznu brzinu v_f nalazimo preko prvog izvoda koordinate po vremenu:

$$v_f = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega_0}{k_0}. \quad (8.2.11)$$

Dakle, fazna brzina jednaka je odnosu frekvencije i talasnog broja, kako smo našli i za ravanski talas (D-8.1.2b).

Brzina kojom se kreće obvojnica talasnog paketa naziva se grupna brzina. Dobijamo je iz jednačine (8.2.6), ili (8.2.10) tako što argument obvojnice, sink funkcije, izjednačimo sa nulom, čime definišemo maksimum talasnog paketa:

$$\omega' t - x = 0.$$

Grupnu brzinu nalazimo iz prvog izvoda puta po vremenu:

$$v_g = \frac{dx}{dt} = \omega' \quad (8.2.12a)$$

a imajući na umu da je ω' prvi izvod frekvencije po talasnom broju (8.2.2b):

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}. \quad (8.2.12)$$

U sredini u kojoj nema disperzije, odnosno kada fazna brzina ne zavisi od k (ili λ), fazna i grupna brzina su međusobno jednake. Zaista, ako u izrazu za grupnu brzinu v_g , ω zamenimo sa $v_f \cdot k$, kao što sledi iz jednačine (8.2.11), nalazimo da je grupna brzina v_g :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}(v_f k) = v_f \quad (8.2.13)$$

jer je v_f konstanta. U slučaju kada fazna brzina zavisi od k , $v_f = f(k)$, može da se izvede veza između fazne i grupne brzine:

$$v_g = \frac{d(kv_f)}{dk} = v_f + k \frac{dv_f}{dk} = v_f + k \frac{dv_f d\lambda}{d\lambda dk} \quad (8.2.14)$$

ili kada se uzme u obzir jednačina (D-8.1.6):

$$v_g = v_f - \frac{2\pi}{k} \frac{dv_f}{d\lambda} = v_f - \lambda \frac{dv_f}{d\lambda}. \quad (8.2.15)$$

Dakle, faznom brzinom se opisuje kretanje nosećeg talasa, a grupnom njegove amplitudne modulacije. Kretanje čestice opisuje se grupnom brzinom v_g .

Predstavljanje čestice talasnim paketom izgleda vrlo privlačno jer omogućava tumačenje kako njenih „čestičnih” tako, i „talasnih” svojstava. Pokazuje se, međutim, da talasni paket dobro predstavlja svojstva čestice samo u prvoj aproksimaciji. Ako se izvede tačniji račun i u razvoju ω u Tejlorov red po k zadrži i član drugog reda, pokazuje se da u sredini u kojoj postoji disperzija, talasni paket ne zadržava svoj oblik, već se rasplinjava, što ne odgovara ponašanju čestica.

8.2.1 Talasni paket i Furijeova analiza

Upravo smo videli da se čestica predstavljena talasnom jednačinom lokalizuje u prostoru, tako što se umesto jednim talasom predstavlja skupom talasa koji obrazuju talasni paket. Talasi koji čine talasni paket, moraju da imaju neprekidnu raspodelu talasnih dužina (frekvencija, energija) u okolini De Brolijeve talasne dužine, jer se samo tada postiže željena lokalizacija talasa/čestice. Ovo lako može da se shvati iz ugla Furijeove analize, dodatak D-8.2, iz koje sledi da svaka periodična funk-

cija može da se opiše Furijeovim redom (D-8.2.18), čije komponente imaju diskretnu raspodelu frekvencija. To znači da talas, koji je periodična funkcija u prostoru i vremenu, ima diskretnu raspodelu talasnih vektora, talasnih dužina, frekvencija i energija. Zbog jednostavnosti, posmatraćemo posebno osobine u vremenskom, t , i u prostornom x , domenu:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} g_n e^{+nk_0 t} \quad (8.2.16a)$$

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} g_n e^{+n\omega_0 t} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} g_n e^{+nE_0 t/\hbar}. \quad (8.2.16b)$$

Harmonijske (pravilne sinusne ili kosinusne) oscilacije imaju samo osnovnu komponentu, $n=1$, dok složeniji oblici oscilovanja imaju veći broj komponenta, $n>1$. Na Slici D-8.2.6 prikazano je razvijanje beskonačnog pravougaonog talasa u Furijeov red, prema relacijama (8.2.16), za različite vrednosti n . Dakle, razvojem po (8.2.16) periodična funkcija (talas) proizvoljnog oblika, opisuje se preko zbira harmonijskih oscilacija, pri čemu koeficijenti, g_n , koji mogu da se izračunaju po jednačini (D-8.2.21), zavise od oblika talasa.

Talas lokalizovan u prostoru ili vremenu nije beskonačno periodičan, dakle, može da se opiše samo aperiodičnom funkcijom. Za opis aperiodične funkcije preko zbira osnovnih trigonometrijskih funkcija, raspodela frekvencija mora biti neprekidna i tako umesto sume po diskretnim frekvencijama dolazimo do integrala (D-8.2.29). Drugim rečima, talasni paket (aperiodičnu funkciju) možemo da predstavimo slaganjem velikog broja talasa (osnovnih trigonometrijskih funkcija) sa neprekidnom raspodelom talasnih brojeva („za paket” u prostoru) ili frekvencija (za „paket” u vremenu). Po ugledu na (D-8.2.29) nalazimo:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{+ikx} dk \quad (8.2.17a)$$

$$f(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega) e^{-i\omega t} d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} F(E) e^{-iE t/\hbar} dE. \quad (8.2.17b)$$

Dakle, obvojnici talasnog paketa, $f(x)$, nalazimo Furijeovom transformacijom funkcije raspodele talasnih brojeva, $F(k)$. U slučaju koji smo ispitivali u ovom odeljku, našli smo izraz za obvojnici talasnog paketa pri uniformnoj raspodeli talasnih brojeva u intervalu $(k_0 - \Delta k, k_0 + \Delta k)$:

$$(8.2.5) \quad A(x, t) = \psi \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i(x - \omega t)\xi} d\xi.$$

Ako raspodelu talasnih brojeva, $F(k-k_0)=F(\xi)$, predstavimo odgovarajućom funkcijom:

$$F(\xi) = \Pi_{2\Delta k}(\xi)$$

izraz (8.2.5) možemo da napišemo u obliku Furijeove transformacije:

$$A(x, t) = \Psi_0 \int_{-\infty}^{\infty} \Pi_{2\Delta k}(\xi) e^{i(x-\omega' t)\xi} d\xi \quad (8.2.18)$$

i da nađemo rešenje bilo iz tabela Furijeovih transformacija bilo neopsrednim integraljenjem. Recimo, iz jednačine (D-8.2.40), zamenom promenljivih, $\omega \rightarrow x-\omega' t$ nalazimo:

$$A = \frac{2\Psi_0\Delta k \sin[(x-\omega' t)\Delta k]}{\pi (x-\omega' t)\Delta k}. \quad (8.2.19)$$

Poslednji izraz se od (8.2.6) razlikuje za faktor $(1/\pi)$ što je posledica različitog izbora oblika Furijeove transformacije, a što na ovom mestu nije značajno. Najvažnije je da uočimo da između oblika talasnog paketa i raspodele talasnih brojeva postoji jednoznačna veza, tj., obvojnica talasnog paketa i raspodele talasnih brojeva predstavljaju Furijeov transformacioni par, $A(x) \leftarrow FT \Rightarrow F(k)$. Na primer, ako česticu/talas želimo da ograničimo u prostornom intervalu $(x_0 - \Delta x, x_0 + \Delta x)$, s uniformnom raspodelom, $A(x) \propto \Pi_{2\Delta x}(x)$, tada je $F(k) \propto \text{sinc}(k)$. Dakle, pomoću Furijeove transformacije možemo da odredimo oblik talasnog paketa za proizvodnju raspodelu talasnih brojeva, i obrnuto, da nađemo oblik talasnog paketa za zadanu raspodelu talasnih brojeva.

Primeri

Primer 8.2.1 Izračunati talasnu dužinu De Brogljevih talasa pridruženih atomima helijuma na temperaturu od $T=293\text{K}$ i pri pritisku od 1 atm. Uporediti talasnu dužinu helijumovih atoma sa srednjim slobodnim putem. Da li kvantni uticaji ovde igraju neku ulogu?

REŠENJE:

Na osnovu Maksvelove raspodele brzina, srednja brzina v_{sr} molekula je:

$$v_{sr} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$$

gde je k Bolcmanova konstanta, T , temperatura, a m masa atoma helijuma. Zamenom ovih vrednosti u prethodnoj jednačini dobijamo:

$$v_{sr} = \sqrt{\frac{8 \times (1,381 \times 10^{-23} \text{J/K}) \times (293 \text{K})}{3,14270 \times 4 \times 1,661 \times 10^{-27} \text{kg}}} = 1,25 \times 10^3 \text{m/s}.$$

Talasna dužina De Broglievog talasa pridruženog helijumovom atomu je:

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{(6,626 \times 10^{-34} \text{ J})}{(4 \times 1,661 \times 10^{-27} \text{ kg} \times 1,25 \times 10^3 \text{ m/s})} = 0,798 \times 10^{-10} \text{ m} .$$

Srednji slobodni put δ je:

$$\delta = \frac{kT}{\sqrt{2}\pi\sigma^2 p}$$

$\pi\delta^2$ je efikasni presek i u ovom slučaju iznosi $1,3 \times 10^{-19} \text{ m}^2$, p je pritisak. Zamenimo sada brojne vrednosti da bismo odredili δ :

$$\delta = \frac{(1,381 \times 10^{-23} \text{ J/K}) \times (293 \text{ K})}{1,414 \times (1,3 \times 10^{-19} \text{ m}^2) \times (1,013 \times 10^5 \text{ Nm}^2)} = 2,88 \times 10^{-7} \text{ m} .$$

Kao i kod rasejavanja sa nepokretnih objekata, kvantne (talasne) osobine čestice ispoljavaju se samo ako je talasna dužina čestice istog reda veličine kao i rastojanje među objektima. Pošto je srednji slobodni put δ daleko veći od De Broglievjeve talasne dužine pridružene helijumovom atomu, $\delta \geq \lambda$, kvantni efekti se ne ispoljavaju.

Primer 8.2.2 Izvesti izraz za faznu brzinu De Broglievih talasa (koji predstavljaju slobodnu česticu) u: a) klasičnom, b) relativističkom slučaju.

REŠENJE:

Iz jednačine 8.2.11 sledi:

$$v_f = \frac{\omega_0}{k} = \frac{2\pi v}{2\pi/\lambda} = \frac{h v}{h/\lambda} = \frac{E}{p} .$$

Kako je reč o slobodnoj čestici sa kinetičkom energijom $T = mv^2/2$:

$$a) \quad v_f = \frac{mv^2/2}{mv} = v/2; \quad b) \quad v_f = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v} \geq c .$$

Treba, međutim, napomenuti da poslednji rezultat ($v_f > c$) nije u protivrečnosti sa teorijom relativnosti jer fazna brzina De Broglievih talasa ne predstavlja veličinu pridruženu nekom stvarnom fizičkom procesu, koji bi možda mogao da se potvrdi eksperimentalno.

Primer 8.2.3 Pokazati da je u: a) klasičnom, i b) relativističkom slučaju, grupna brzina jednaka brzini kretanja čestice.

REŠENJE:

Iz jednačine (8.2.13) sledi:

$$a) \quad v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(2\pi v)}{d(2\pi/\lambda)} = \frac{2\pi d(hv)}{2\pi d(h/\lambda)} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \left(\frac{p^2}{2m} \right) = \frac{p}{m} = v$$

jer je $E = T = mv^2/2$, a $p = mv$;

$$b) \quad v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} = \frac{2pc^2}{2E} = \frac{mv c^2}{mc^2} = v.$$

Primer 8.2.4 Izračunati De Brogljijevu talasnu dužinu elektrona koji u akceleratoru stiču energiju od 10 MeV-a.

REŠENJE:

Impuls elektrona izračunaćemo koristeći jednačinu relativističke mehanike (D-7.4.6), jer čestica tako velike energije (10 MeV-a) ima relativističku brzinu:

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{T^2 + 2m_0 c^2 T}$$

u kojoj je p impuls, T kinetička energija, a m_0 masa mirovanja elektrona, dok je c brzina svetlosti. De Brogljijeva talasna dužina je tada:

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{h}{p} = \frac{hc}{\sqrt{T^2 + 2m_0 c^2 T}} = \\ &= \frac{6,626 \times 10^{-34} \text{ Js} \times 2,998 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}}{\sqrt{(10^7 \times 1,6 \times 10^{-19})^2 \text{ J}^2 + 2 \times 10^7 \times 1,602 \times 10^{-19} \text{ J} \times 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (2,998 \times 10^8)^2 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}}} = \\ &= \frac{19,864 \times 10^{-26}}{1,682 \times 10^{-12}} \text{ m} = 0,118 \times 10^{-12} \text{ m} = 0,118 \times 10^{-3} \text{ nm}. \end{aligned}$$

Primer 8.2.5 Koliku kinetičku energiju elektron treba da ima pa da njegova De Brogljijeva talasna dužina bude jednaka Komptonovoj.

REŠENJE:

Izjednačićemo izraze za De Brogljijevu (8.1.1) i Komptonovu talasnu dužinu, a impuls ćemo zameniti koristeći izraz (D-7.4.6) iz relativističke mehanike:

$$\begin{aligned} \lambda &= \lambda_c \quad \Rightarrow \quad \frac{h}{p} = \frac{h}{m_0 c} \quad \Rightarrow \\ \frac{c}{\sqrt{T^2 + 2m_0 c^2 T}} &= \frac{1}{m_0 c} \quad \Rightarrow \quad m \cdot c^2 = \sqrt{T^2 + 2m_0 c^2 T} \quad \Rightarrow \\ T^2 + 2m_0 c^2 T - m_0^2 c^4 &= 0 \quad \Rightarrow \quad T = (\sqrt{2} - 1)m_0 c^2 \\ &= (1,414 - 1) \times 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \times (2,998 \times 10^8)^2 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2} = \\ &= \frac{3,391 \times 10^{-14} \text{ J}}{1,602 \times 10^{-19}} = 2,117 \times 10^5 \text{ eV}. \end{aligned}$$

8.3 PRINCIP NEODREĐENOSTI

U makrosvetu (koji opisuje klasična mehanika) stanje sistema definisano je položajem i brzinom (odnosno impulsom) svake njegove čestice u određenom trenutku. Podrazumeva se da ovi parametri mogu da se dobiju merenjem, kao i da proces merenja ostavlja sistem u istom stanju u kojem je bio pre merenja. Dakle, uzajmno dejstvo sistema i mernog uređaja smatra se zanemarljivim. Ako je poznato početno stanje sistema, i sile koje deluju na čestice sistema, tada rešavanjem Njutnovih jednačina kretanja može da se predvidi stanje sistema u bilo kojem budućem momentu. Takođe, podela na talase i čestice se podrazumeva.

Međutim, u mikrosvetu podela na čestice i talase nije moguća. Isti objekat, na primer, elektron, ispoljava čestična odnosno talasna svojstva, zavisno od uslova pod kojima se posmatra. Na primer, u maglenoj komori elektron ostavlja trag kao čestica, dok se sa kristalne rešetke rasejava kao talas. Merenje koje ne predstavlja nikakav pojmovni problem u klasičnoj mehanici, u opisu mikrosveta ima centralnu ulogu. Nemoguće je čak i zamisliti proces merenja koji ne bi uticao na stanje posmatranog mikroobjekta. Drugim rečima, pri preciznom merenju jedne veličine, neka druga veličina se nepredvidivo menja. Skup podataka koji mogu da se dobiju o mikroobjektu razlikuje se od onih koji se dobijaju za mikročesticu. Osnovni postulat kvantne mehanike, discipline koje se bavi opisom pojava u mikrosvetu, sadržan je u iskazu da svi podaci o sistemu mogu da se dobiju ako je poznata njegova talasna funkcija.¹¹ Međutim, može da se pokaže da poznavanje talasne funkcije ne omogućuje izračunavanje svih veličina za koje bi se, slično kao kod makročestica, očekivalo da ih mikroobjekt ima. Relativne odnose među fizičkim parametrima mikroobjekata pri njihovom merenju prvi je formulisao Verner Hajzenberg 1927. godine kao princip neodređenosti. Princip neodređenosti izražava se relacijama neodređenosti. Na jednom predavanju o ovoj temi Hajzenberg je rekao: *„Bliže ispitivanje formalizma pokazuje da između tačnosti sa kojom može da se utvrdi mesto čestice i tačnosti sa kojom istovremeno može da se sazna njen impuls, postoji relacija po kojoj je proizvod verovatnih grešaka u merenju mesta i impulsa bar onoliki kolika je Plankova konstanta podeljena sa 4π . Ove relacije neodređenosti za rezultate merenja klasičnih promenljivih daju potrebne uslove da rezultati merenja budu izraženi u formalizmu kvantne teorije. Bor je pokazao kako poremećaj, nužno vezan sa svakim posmatranjem (merenjem) prouzrokuje da ne može da se ide ispod granice tačnosti koju postavljaju relacije neodređenosti. On tvrdi da je u konačnom rezultatu neodređenost, uvedena pomoću pojma merenja i sama odgovorna za deo poremećaja koji u osnovi ostaje nepoznat... Vizuelni opis atomskih pojava moguć je samo u izvesnim granicama tačnosti – ali u tim granicama zakoni klasične fizike još se primenjuju. Štaviše, zbog ovih granica tačnosti koje su definisane relacijama neodređenosti, vizuelna slika atoma nije oslobođena višeznačnosti. Naprotiv, pojmovi čestice i talasa podjednako služe kao osnova za vizuelno tumačenje.*

Zakoni kvantne mehanike u osnovi su statistički. Iako su parametri nekog atomskog sistema određeni u svojoj ukupnosti eksperimentom, rezultat budućeg opažanja sistema ne može uopšte da se tačno predvidi. Ali u svakom kasnijem trenutku ima opažanja iz kojih proizlaze očekivani rezultati. Za druga opažanja mogu da se daju samo verovatnoće za pojedine ishode eksperimenta. Step en izvesnosti koji je još vezan uz zakone kvantne mehanike odraz je činjenice da su principi o održanju

¹¹ Talasna funkcija dobija se rešavanjem Šredingerove jednačine koja u mikrosvetu igra onu ulogu koju Njutnove jednačine imaju u klasičnoj mehanici.

energije, impulsa i momenta impulsa još uvek striktno na snazi. Oni mogu biti provereni sa svakom željenom tačnošću i tada će vredeti sa tačnošću sa kojom su provereni.”

Prikažaćemo sada Hajzenbergove relacije neodređenosti. Ako sa Δx (Δy , Δz) označimo neodređenost (grešku sa kojom možemo da izvršimo merenje) položaja duž x - (y, z) ose neke mikročestice, tada je neodređenost Δp_x (Δp_y , Δp_z) impulsa p_x (p_y , p_z) ograničena relacijama:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}; \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{h}{4\pi}; \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{h}{4\pi} \quad (8.3.1)$$

koje se nazivaju Hajzenbergove relacije neodređenosti (h je Plankova konstanta) i izražavaju kvantnomehanički princip neodređenosti. Relacije (8.3.1) pokazuju da je proizvod neodređenosti koordinate i impulsa duž te iste koordinate u najboljem slučaju reda veličine Plankove konstante h odnosno da postoji granica tačnosti kojom se istovremeno mogu odrediti merenjem položaj čestice i njen impuls duž iste koordinate. Pod neodređenošću impulsa odnosno koordinate podrazumeva se njihovo srednje kvadratno odstupanje od odgovarajuće srednje vrednosti (impulsa ili koordinate), a relacije smo eksplicitno izveli kao zadatak 9.2.1 u poglavlju 9.2 korišćenjem kvantnomehaničkih postulata. Princip neodređenosti je opšti princip i nije ograničen samo na pojave u mikrosvetu ali se u makrosvetu njegove posledice praktično ne pokazuju jer su neodređenosti koje nastaju iz drugih razloga (netačnost merenja, itd.) mnogo redova veličine veće. Pokažimo ovo na primerima.

Primeri

Primer 8.3.1 Izračunati neodređenost brzine tela koje ima masu 1 g ako je neodređenost njegovog položaja $\Delta x = 10^{-4}$ cm.

Iz relacije neodređenosti (8.3.1) sledi minimalna neodređenost brzine:

$$\Delta v_x = \frac{\Delta p_x}{m} = \frac{h}{4\pi m \Delta x} = \frac{(6,6 \times 10^{-34} \text{ Js})}{4\pi (10^{-3} \text{ kg})(10^{-6} \text{ m})} = 5,2 \times 10^{-26} \text{ ms}^{-1}$$

tj. neodređenost brzine leži daleko izvan granice mogućnosti merenja. Ako istu relaciju primenimo na mikročesticu, dobićemo sasvim drukčiji rezultat.

Primer 8.3.2 Izračunati neodređenost brzine elektrona u atomu.

Neodređenost brzine v_x zavisi od tačnosti određivanja položaja elektrona Δx . Neka se elektron nalazi u atomu – tada tačnost određivanja njegovog položaja treba da bude bar 10^{-11} m jer su dimenzije atoma 10^{-10} m. Kako je masa elektrona $9,1 \times 10^{-31}$ kg, pomoću (8.3.1) se dobija:

$$\Delta v_x = \frac{(6,6 \times 10^{-34} \text{ Js})}{4\pi (9,1 \times 10^{-31} \text{ kg})(10^{-11} \text{ m})} = 6,1 \times 10^6 \text{ ms}^{-1}.$$

Ako se zna da energiji od 10 eV (što je red veličine energije elektrona u atomskom omotaču) odgovara brzina od $1,87 \times 10^6 \text{ ms}^{-1}$, vidimo da je neodređenost brzine istog reda veličine kao i sama brzina.

Značenje i mesto relacija neodređenosti u odnosu na makro i mikrosvet može da se uporedi s ulogom brzine svetlosti u odnosu klasične (Njutnove) i relativističke (Ajnštajnovne) fizike. U klasičnoj fizici posmatraju se objekti koji se kreću brzinama koje su znatno manje od brzine svetlosti i sve dok je tako, Njutnove jednačine daju potpuno tačne rezultate. Ali, kada brzina čestice postane uporediva sa brzinom svetlosti javljaju se kvalitativno nova svojstva koja zahtevaju nove pojmove. Ulogu koju brzina svetlosti ima pri prelasku iz klasične u relativističku fiziku, pri prelasku iz oblasti važenja klasične u kvantnu mehaniku, igra Plankova konstanta.

Sledeća, važna relacija neodređenosti glasi:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{h}{4\pi} \quad (8.3.2)$$

gde je ΔE neodređenost energije, a Δt neodređenost (opsega) vremena. Zajedničko za relacije neodređenosti (8.3.1) i (8.3.2) je da su međusobno povezane veličine čiji proizvod ima dimenzije dejstva (energija · vreme). Tačnije poznavanje jedne od para veličina ima za posledicu veću neodređenost druge. Postoji, međutim, bitna razlika u tumačenju relacija neodređenosti (8.3.1) u odnosu na relaciju (8.3.2). U relacijama neodređenosti koje povezuju koordinatu i impuls duž iste koordinate podrazumeva se da obe veličine mogu da se mere u istom trenutku t . Statistička raspodela rezultata merenja kao i odstupanja $\Delta x \cdot \Delta p_x$ ($\Delta y \cdot \Delta p_y$; $\Delta z \cdot \Delta p_z$) biće određeni talasnom funkcijom sistema u određenom trenutku. U relaciji neodređenosti (8.3.2) povezani su neodređenost energije datog stanja sa vremenom evolucije (promene) energije tog stanja, pa energija sistema koji se u vremenu Δt održava u određenom energijskom stanju, može da se odredi sa tačnošću $\Delta E \geq \hbar / (2 \cdot \Delta t)$. Sa druge strane, relaciju neodređenosti (8.3.2) možemo dovesti u vezu i sa načinom na koji se određuje energija. Tačnost određivanja energije povezuje se tada sa vremenom Δt , koje je potrebno da se merenje obavi. Tako, energija pobuđenog stanja atoma može da se odredi u eksperimentu u kome se ispitivani atomi bombarduju snopom monoenergijskih elektrona, a meri se energija koju elektroni u neelastičnim sudarima sa atomima gube. Vreme merenja ovde ima red veličine vremena sudara, dok neodređenost energije odgovara neodređenosti energije primenjenih elektrona.

Postojanje prirodne širine spektralnih linija predstavlja posledicu važenja relacije neodređenosti. Prema relaciji neodređenosti (8.3.2) proizvod srednjeg vremena života i neodređenosti energije pobuđenog stanja sistema atoma, jezgara, itd. uvek je veći ili jednak $\hbar/2$. O ovome ćemo detaljnije govoriti kasnije.

8.3.1 Talasni paket i relacije neodređenosti

Relacija neodređenosti za impuls i koordinatu

Posmatrajmo slobodnu česticu predstavljenu De Brolijevom talasom, (8.1.23). Zbog jednostavnosti, razmatramo jednodimenzioni slučaj i to u proizvoljnom vremenu, $t=t_0$. Time se izraz za talasnu jednačinu pojednostavljuje, pa iz (8.1.22) dobijamo:

$$\psi(x, t_0) = \psi_0(t_0) e^{\frac{i}{\hbar} p_{0,x} x} \quad (8.3.3)$$

pri čemu smo konstantni fazni faktor, $iE_0 t_0/\hbar$ uključili u konstantu $\psi_0(t_0)$. Jednačina (8.3.3) predstavlja talas slobodne čestice koja se s impulsom $p_{0,x}$ kreće duž x -ose a koju posmatramo „zamrznutu” u momentu t_0 . Čestica ima dobro određen impuls, $p_{0,x}$, ali je njena koordinata potpuno neodređena pošto se ravanski talas kojim je čestica opisana prostire duž x -ose bez ograničenja. Da bismo česticu lokalizovali treba da saberemo seriju talasa sa neprekidnom raspodelom talasnih brojeva u intervalu $\pm \Delta k$ u okolini talasnog broja nosećeg talasa, k_0 . S obzirom na vezu između talasnog broja i impulsa čestice, $p_x = \hbar k$, raspodelu talasnih brojeva možemo da izrazimo preko raspodele impulsa u intervalu $(p_{0,x} - b, p_{0,x} + b)$ gde je $p_{0,x}$ impuls čestice. Slično kao kod jednačine (8.2.1), iz (8.3.3) dobijamo izraz za talasni paket (TP):

$$\Psi_{TP}(x, t_0) = \Psi_0(t_0) \int_{p_{0,x}-b}^{p_{0,x}+b} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} dp_x \quad (8.3.4)$$

ili, po ugledu na (8.2.18):

$$\Psi_{TP}(x, t_0) = \Psi_0(t_0) \int_{-\infty}^{+\infty} \Pi_{2b}(p_x - p_{0,x}) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} dp_x. \quad (8.3.5)$$

Poslednji izraz predstavlja Furijeovu transformaciju pravougaone impulsne funkcije. Mada se integral (8.3.5) može naći u tabelama Furijeovih transformacija, a izračunali smo ga i u odeljku D-8.2, vežbe radi, ovde ćemo ponovo da ga izračunamo. Polazeći od (8.3.4), proširenjem diferencijala nalazimo:

$$\Psi_{TP}(x, t_0) = \Psi_0(t_0) \left(\frac{\hbar}{ix} \right) \int_{p_{0,x}-b}^{p_{0,x}+b} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} d\left(p_x \frac{ix}{\hbar}\right) \quad (8.3.6)$$

odakle integraljenjem, nakon zamene promenljive i granice integrala, $ip_x x/\hbar \rightarrow \xi$, $P_{0,\pm b} \rightarrow (P_{0,\pm b}) ix/\hbar$, nalazimo:

$$\Psi_{TP}(x, t_0) = \Psi_0(t_0) \left(\frac{\hbar}{ix} \right) e^{\xi} \Big|_{\frac{i}{\hbar} x(p_{0,x}-b)}^{\frac{i}{\hbar} x(p_{0,x}+b)}. \quad (8.3.7)$$

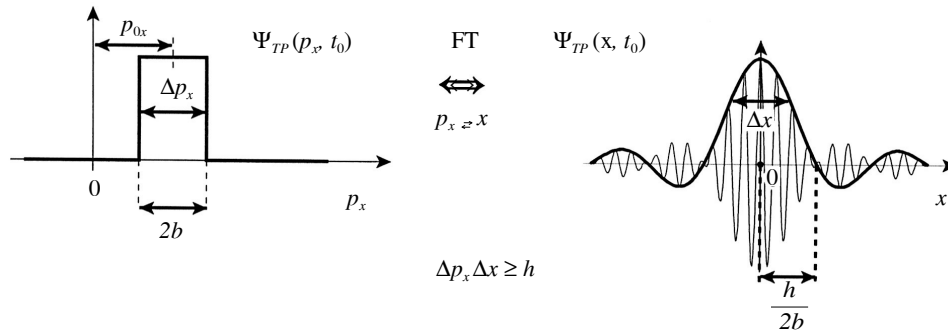
Zamenom granica dobijamo:

$$\Psi_{TP}(x, t_0) = \Psi_0(t_0) \left(\frac{\hbar}{ix} \right) e^{\frac{i}{\hbar} p_{0,x} x} \left[e^{+\frac{i}{\hbar} b x} - e^{-\frac{i}{\hbar} b x} \right] \quad (8.3.8)$$

a ako uočimo da je izraz u uglastoj zagradi $2i \sin(bx/\hbar)$ lako nalazimo:

$$\Psi_{TP}(x, t_0) = 2b\psi_0(t_0)e^{\frac{i}{\hbar}p_{x,0}x} \operatorname{sinc}\left(\frac{bx}{\hbar}\right). \quad (8.3.9)$$

Dobijeno rešenje je isto kao (8.2.8) (uz $bx/\hbar = \eta$) ili (D-8.2.40b) (pri $p_{x,0} = 0$). Veza između ograničenja impulsa čestice i njene koordinate, prema (8.3.9), prikazana je na Slici 8.3.1.



Slika 8.3.1 Relacija neodređenosti za impuls i koordinatu. Ako neodređenost impulsa leži u intervalu $2b$, tada je neodređenost koordinate $\hbar/2b$. Sužavanjem intervala $2b$ smanjuje se neodređenost impulsa ali raste neodređenost koordinate, pri čemu važi (8.3.8). Funkcija raspodele impulsa i funkcija raspodele koordinate obrazuju Furijeov transformacioni par. Na slici su pokazani samo realni delovi funkcija.

Impuls čestice je ograničen proizvoljno izabranim intervalom $\pm b$ u okolini impulsa nosećeg talasa, $p_{0,x}$, dok je njen položaj definisan sink funkcijom. Pošto obvojnica sink funkcije ($1/x$) opada sa rastojanjem od njenog centra težeći asimptotski nuli, čestica nije lokalizovana u jasno definisanom intervalu. Definicija intervala je prilično proizvoljna jer zavisi od odabranog kriterijuma. Na primer, u spektroskopiji, kao osnovni interval uzima se širina krive raspodele na polovini njene visine. Drugi podjednako dobar kriterijum, uobičajen u statistici, je da se interval definiše tako da integral u granicama intervala bude jednak polovini ukupnog integrala funkcije raspodele. Zbog jednostavnosti, kao osnovni interval za sink funkciju, Δx , biramo rastojanje od maksimuma do prve nule. Prva nula se javlja kada je argument funkcije π , pa iz jednačine (8.3.9) nalazimo da je granica intervala u kome pretpostavljamo da je čestica lokalizovana:

$$\frac{b\Delta x}{\hbar} = +\pi$$

a zamenom $\Delta p_x = 2b$ [neodređenost impulsa jednaka je širini odabranog intervala ($p_{0,x} - b, p_{0,x} + b$)] nalazimo vezu između intervala u kome se čestica najverovatnije nalazi, Δx , i intervala u kome se nalazi impuls čestice, Δp_x :

$$\Delta p_x \Delta x = \hbar.$$

Pošto postoji konačna verovatnoća da se čestica nađe i van intervala Δx , dakle, moguće je da je neodređenost njenog položaja veća od odabranog intervala, ispravnije je da pišemo:

$$\Delta p_x \Delta x \geq h. \quad (8.3.10)$$

Ova relacija kvalitativno izražava Hajzenbergov princip neodređenosti. Iz optike je poznato da se talas ograničen u prostoru ne može smatrati monohromatskim (određene talasne dužine), pa kod njemu odgovarajućeg talasnog paketa [videti i relaciju (D-8.2.43)] važi $\Delta k \cdot \Delta x \sim 2\pi$. Kada se umesto ravnog talasa posmatraju De Brojljevi talasi ili talasi materije ograničeni u prostoru a onda predstavljaju talasnim paketom, dobija se relacija (8.3.10). Podsetimo se na to da je funkcija (jednačina) De Brojljevog talasa dobijena iz jednačine ravnog ugrađivanjem uslova o kvantovanosti energije $\omega = (E/\hbar)$ i $|\vec{p}| = \hbar |\vec{k}|$ iz De Brojljeve relacije.

Iz relacije (8.3.10) sledi da koordinata i impuls čestice/talasa, u principu, ne mogu istovremeno da se odrede sa proizvoljnom tačnošću. Povećanje tačnosti pri određivanju jedne veličine neminovno vodi povećanju neodređenosti za drugu. U konkretnom slučaju kada tačno znamo impuls čestice/talasa ništa ne znamo o položaju. Kada česticu/talas lokalizujemo u izvesnom intervalu, Δx , tada i impuls postaje neodređen u intervalu Δp_x , pri čemu je veza između neodređenosti impulsa i koordinate, data relacijom neodređenosti (8.3.10).

Relacija neodređenosti za energiju i vreme

U potpunoj analogiji sa vezom između neodređenosti impulsa i koordinate možemo da izvedemo vezu za neodređenost energije i vremena. Ovog puta, umesto čestice, posmatramo elektromagnetni talas u proizvoljno izabranoj tački prostora, \vec{r}_0 . Time talasnu funkciju (8.1.23) dobijamo u jednostavnijem obliku:

$$\psi(r_0, t) = \psi_0(r_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \quad (8.3.11)$$

u kome smo konstantan fazni faktor koji zavisi od koordinate i impulsa uključili u konstantu, $\psi_0(r_0)$. Talas je monohromatski, dakle, ima dobro definisanu energiju, E_0 , ali se širi beskrajno u vremenu.

Posmatrajmo sada šta se dešava ako se umesto u kontinualnom snopu talas emituje u kratkom pulsu, Δt . Ovo je slučaj koji se često sreće kako kod elementarnih procesa (stimulisana emisija), tako i kod brojnih primena (radio-telegrafija, pulsna spektroskopija, optoelektronika, itd.). Dakle, puls elektromagnetnog talasa lako se realizuje a naš cilj je da takvu situaciju teorijski opišemo. Ovakav oscilatorni proces ograničenog vremena trajanja smatra se kvazimonohromatskim i ubraja u neperiodične procese koji se razlažu u spektar pomoću Furijeove transformacije. U potpunoj analogiji sa lokalizacijom u prostoru, lokalizaciju u vremenu postižemo superpozicijom velikog broja talasa sa promenljivom amplitudom i kontinualnom promenom energije (talasne dužine):

$$\Psi_{TP}(r_0, t) = \Psi_0(r_0) \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{TP}(r_0, E) e^{\frac{i}{\hbar} Et} dE . \quad (8.3.12)$$

Ovaj slučaj se neznatno razlikuje od prethodnog jer raspodelu u vremenu [oblik talasnog paketa (TP)] već znamo:

$$\Psi_{TP}(r_0, t) = \Psi_0(r_0) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \Pi_{2b}(t - t_0) \quad (8.3.13)$$

a tražimo raspodelu energija superponiranih talasa, $\Psi(r_0, E)$. Treba da uočimo to da je $\Psi_{TP}(r_0, t)$ u izrazu (8.3.12) (inverzna) Furijeova transformacija funkcije $\Psi_{TP}(r_0, E)$. Transformacijama tipa (D-8.2.38) ili iz poznatog odnosa direktne i inverzne Furijeove transformacije, (D-8.2.37), lako nalazimo da je:

$$\Psi_{TP}(r_0, E) = f_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{TP}(r_0, t) e^{+\frac{i}{\hbar} Et} dt . \quad (8.3.14)$$

Konstantu f_1 , koja zavisi od načina predstavljanja Furijeove transformacije, nema potrebe da preciziramo. Zamenom izraza (8.3.13) u (8.3.14) dobijamo funkciju raspodele energija talasa čiji zbir formira pravougaoni talasni puls, širine $2b$:

$$\Psi_{TP}(r_0, E) = \Psi'_0(r_0) \int_{-\infty}^{+\infty} \Pi_{2b}(t - t_0) e^{+\frac{i}{\hbar}(E - E_0)t} dt . \quad (8.3.15)$$

Nova konstanta pred integralom, Ψ' uključuje sve prethodne i nećemo je bliže određivati. Istim postupkom kao u prethodnom odeljku nalazimo:

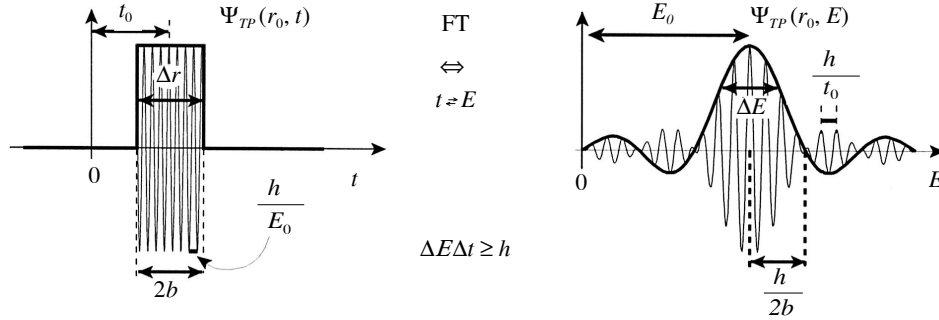
$$\Psi_{TP}(r_0, E) = 2b \Psi'_0(t_0) e^{\frac{i}{\hbar}(E - E_0)t_0} \operatorname{sinc}\left(\frac{b(E - E_0)}{\hbar}\right) \quad (8.3.16)$$

i koristeći iste kriterijume za definisanje osnovog intervala, ΔE , i iste argumente ($\Delta t = 2b$) nalazimo da je:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar . \quad (8.3.17)$$

Dakle, kod pravougaonog pulsa monohromatskog elektromagnetnog zračenja energija je raspodeljena u okolini prvobitne energije, E_0 , u intervalu, ΔE , koji je obrnuto

proporcionalan širini pulsa. Veza između neodređenosti energije i neodređenosti vremena za ovaj slučaj, prikazana je na Slici 8.3.2.



Slika 8.3.2 Relacija neodređenosti za energiju i vreme. Ako je talas lokalizovan u vremenskom intervalu $2b$ tada je neodređenost njegove energije $h/2b$. Funkcija raspodele talasa u vremenu i funkcija raspodele njegove energije obrazuju Furijeov transformacioni par. Na slici su pokazani samo realni delovi funkcija.

Za lokalizaciju talasa i raspodelu njegove energije važne su samo obvojnice funkcija. Brze oscilacije funkcije u vremenskom domenu predstavljaju oscilovanje električnog ili magnetnog vektora elektromagnetnog talasa. Brze oscilacije u energijskom domenu fizički nisu značajne jer se pri izračunavanju proizvoda $\psi\psi^*$ (množenju konjugovano kompleksnih brojeva) gube.

8.3.2 Prirodna širina spektralnih linija

Prirodna širina spektralnih linija je direktna posledica principa neodređenosti. Posmatrajmo sistem u kome je u trenutku, $t_0 = 0$, pobuđeno N_0 atoma. Iz pobuđenog stanja atomi spontano prelaze u osnovno, emitovanjem kvanta energije ili predajom energije u sudarima sa drugim atomima. Proces je statističke prirode, pa ne može da se predvidi kada će određeni atom preći iz pobuđenog u osnovno stanje. Međutim, može da se predvidi koji će deo od ukupnog broja atoma, u intervalu Δt (između t i $t + \Delta t$) ostati u pobuđenom (ekscitovanom) stanju. U kratkom vremenskom intervalu, Δt , brzina kojom se atomi vraćaju iz pobuđenog u osnovno stanje, $\Delta N(t)\Delta t$ proporcionalna je broju pobuđenih atoma, $N(t)$:

$$\frac{\Delta N}{\Delta t} = -\zeta N(t). \quad (8.3.18)$$

Negativni znak pokazuje to da broj pobuđenih atoma opada sa vremenom. Konstanta brzine, ζ (zeta), predstavlja relativno smanjenje broja pobuđenih atoma (u odnosu na njihov trenutni broj) u jedinici vremena. Za dovoljno kratko Δt , sa konačnih razlika možemo da pređemo na diferencijale:

$$\frac{dN}{dt} = -\zeta N(t). \quad (8.3.19)$$

Integraljenjem, uz početni uslov $N(0) = N_0$, nalazimo da broj pobuđenih atoma eksponencijalno pada sa vremenom:

$$N(t) = N_0 e^{-\zeta t}. \quad (8.3.20)$$

Mada ne možemo da predvidimo osobine pojedinih atoma, pomoću jednačine (8.3.20) možemo da izračunamo broj pobuđenih atoma u svakom trenutku. Slično, možemo da definišemo srednje vreme života atoma, τ , kao zajedničku osobinu sistema kao celine, iako ne znamo stvarna vremena života pobuđenog stanja za pojedinačne atome. Srednje vreme života računamo tako što ukupno vreme života svih atoma u pobuđenom stanju (uvž) podelimo sa ukupnim brojem pobuđenih atoma:

$$\tau = \frac{\text{ukupno vreme života svih atoma u pobuđenom stanju}}{\text{ukupan broj pobuđenih atoma}} = \frac{1}{N_0} \text{ uvž.} \quad (8.3.21a)$$

Ukupan broj pobuđenih atoma, N_0 , znamo iz početnog uslova. Ukupno vreme života svih pobuđenih atoma određujemo na sledeći način. Prvo, za svako vreme, $t \in (0, \infty)$, nađemo broj atoma koji su se vratili u osnovno stanje u intervalu $(t, t + dt)$. Taj broj jednak je broju atoma čije je vreme života t . Oni koji su se u osnovno stanje vratili ranije, živeli su kraće od t a oni koji su još u pobuđenom stanju živeće duže. Iz jednačine (8.3.19) nalazimo da je broj atoma koji se vrati u osnovno stanje u intervalu $(t, t + dt)$, $dN(t)/dt$, jednak $\zeta N(t)$. Pri tome negativni znak ignorišemo jer nas ne zanima da li broj N raste ili opada. Dakle, broj atoma koji su u pobuđenom stanju proveli vreme t je ζN a njihovo ukupno vreme života je $t\zeta N$. Ukupno vreme života svih pobuđenih atoma nalazimo sabiranjem vremena života atoma iz svih intervala dt , dakle integraljenjem proizvoda $t\zeta N$ po vremenu:

$$\text{uvž} = \int_0^{\infty} t\zeta N dt = \zeta N_0 \int_0^{\infty} t e^{-\zeta t} dt$$

gde smo izraz na desnoj strani dobili zamenom N iz (8.3.20). Tada, prema (8.3.21a) nalazimo:

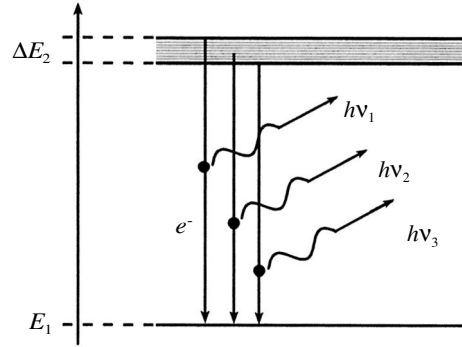
$$\tau = \zeta \int_0^{\infty} t e^{-\zeta t} dt = \frac{1}{\zeta}. \quad (8.3.21b)$$

Integral u poslednjem izrazu lako se nalazi parcijalnim integraljenjem. Dakle, srednje vreme pobuđenog stanja, τ , jednako je recipročnoj vrednosti konstante brzine ζ . Pošto je fizički smisao srednjeg vremena očigledniji, često je izraz (8.3.20) pogodnije pisati u ekvivalentnom obliku:

$$N(t) = N_0 e^{-t/\tau}. \quad (8.3.22)$$

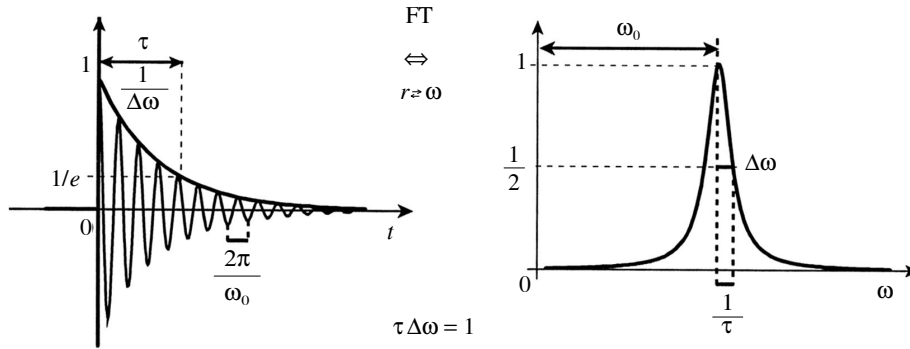
Sa stanovišta principa neodređenosti, ograničeno vreme života pobuđenog stanja može se smatrati kao lokalizacija u vremenu. Tada, prema relaciji (8.3.17) nalazimo:

Slika 8.3.3 Vreme života pobuđenog stanja i raspodela energija emitovanog zračenja. Zbog ograničenog vremena života pobuđenog stanja (lokalizacije u vremenu) dolazi do pojave neodređenosti energije pobuđenog stanja i do raspodele frekvencija emitovanog zračenja. To se eksperimentalno ispoljava kao širenje spektralne linije emitovane pri prelazu elektrona iz E_2 u E_1 .



$$\Delta E \geq \frac{h}{\tau} \quad (8.3.23)$$

dakle, ograničen vek pobuđenog stanja dovodi do pojave neodređenosti energije pobuđenog stanja. Za razliku od pobuđenog stanja, u osnovnom stanju atom boravi proizvoljno dugo vremena, pa može da se uzme da je za osnovno stanje neodređenost vremena beskonačna. Tada iz relacije neodređenosti sledi da je energija atoma u osnovnom stanju potpuno tačno određena (odnosno da je neodređenost nula). Prema tome, pri prelazu atoma iz pobuđenog u osnovno stanje, prirodna širina spektralne linije posledica je neodređenosti energije pobuđenog stanja, Slika 8.3.3.



Slika 8.3.4 Prirodna širina spektralne linije $\Delta\omega$ je direktna posledica konačnog vremena života pobuđenog stanja, τ . Prema jednačini (8.3.31) poluširina na poluvisini linije obrnuto je proporcionalna vremenu života pobuđenog stanja. Obvojica spektralne linije i kriva raspada pobuđenog stanja obrazuju Furijeov transformacioni par. Pokazane funkcije su normalizovane prema sopstvenim maksimalnim vrednostima.

Relativno širenje linije, $\Delta\nu/\nu$, lako nalazimo iz jednačine (8.3.23) deljenjem celog izraza sa $h\nu$:

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} \geq \frac{1}{\tau\nu} \quad (8.3.24a)$$

a s obzirom na vezu $v = c/\lambda$, sledi $|\Delta\lambda/\lambda| = \Delta v/v$ odnosno:

$$\left| \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \right| \geq \frac{\lambda}{\tau c}. \quad (8.3.24b)$$

Treba uočiti to da je proizvod τv jednak broju oscilacija električnog (ili magnetnog) vektora u talasnom paketu koji se obrazuje za vreme elementarnog akta emisije. Isto tako, količnik $\tau c/\lambda$ predstavlja broj talasnih dužina elektromagnetnog talasa unutar emitovanog talasnog paketa. Dakle, relativno širenje spektralne linije može se shvatiti i kao neodređenost broja oscilacija ili broja talasnih dužina u talasnom paketu koji se emituje u vremenu života pobuđenog stanja. Na primer, za spektralnu liniju natrijuma čija je talasna dužina 589 nm, a vreme života pobuđenog stanja 10^{-8} s iz odnosa (8.3.24b) nalazimo:

$$\left| \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \right| \geq \frac{589 \times 10^{-9} m}{3 \times 10^8 m s^{-1} \times 10^{-8} s} \approx 2 \times 10^{-7} \quad (8.3.24c)$$

ili množeći izraz sa λ , $\Delta\lambda \geq 10^{-4}$ nm. Ovako malo širenje linije u vidljivom delu spektra teško je eksperimentalno opaziti jer drugi uzroci (na primer, Doplerov efekt) šire liniju mnogo više. Međutim, u drugim spektralnim područjima vreme života pobuđenog stanja često je glavni uzrok za širenje spektralnih linija te se preko širine linije vreme života najjednostavnije i određuje.

Širenje spektralne linije zbog ograničenog vremena života pobuđenog stanja još elegantnije možemo da analiziramo koristeći Furijeovu transformaciju. Posmatrajmo isti sistem u kome je promena broja pobuđenih atoma tokom vremena određena jednačinom (8.3.22). Povratkom u osnovno stanje pobuđeni atomi emituju elektromagnetne talase frekvencije $\omega_0 = (E_2 - E_1)/\hbar$. Amplituda talasa emitovanog u intervalu $(t, t + dt)$ proporcionalna je broju atoma koji se u tom intervalu vraćaju u osnovno stanje, $dN(t)/dt$, a prema izrazu (8.3.19) proporcionalna je broju pobuđenih atoma, $N(t)$. Dakle, emitovano zračenje opisujemo ravanskim talasom prema jednačini (D-3.1.13):

$$\psi(t) = A(t)e^{-i\omega_0 t} \quad (8.3.25)$$

čija se amplituda, $A(t)$, menja tokom vremena prema jednačini (8.3.22). Zamenom promenljive amplitude iz (8.3.22) nalazimo jednačinu emitovanog talasa:

$$\psi(t) = \psi_0 e^{-t/\tau} e^{-i\omega_0 t}. \quad (8.3.26)$$

Konstanta ψ_0 zavisi od početnih uslova i nećemo je bliže određivati. Amplitudu emitovanog zračenja koja se menja tokom vremena možemo da predstavimo slaganjem velikog broja talasa sa neprekidnom raspodelom frekvencija, čija amplituda zavisi od frekvencije. Međutim, u ovom slučaju kao i u prethodnom, zavisnost amplitude od vremena znamo a tražimo zavisnost amplitude od frekvencije. Kako smo pokazali u prethodnom odeljku, jednačina (8.3.14), zavisnost amplitude od frekvencije, $\psi(\omega)$, nalazimo Furijeovom transformacijom zavisnosti amplitude u vremenu, $\psi(t)$:

$$\psi(\omega) = f_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(t) e^{+i\omega t} dt. \quad (8.3.27)$$

Zamenom jednačine talasa $\psi(t)$ u poslednjem izrazu iz (8.3.26) nalazimo:

$$\psi(\omega) = \psi'_0 \int_0^{+\infty} e^{-t/\tau} e^{+i(\omega - \omega_0)t} dt \quad (8.3.28)$$

pri čemu smo sve konstante spojili u novu konstantu ψ'_0 . Promenili smo i donju granicu integraljenja s obzirom na početni uslov $\psi(t < 0) = 0$. Ovim uslovom izražavamo činjenicu da se sistem pre pobude (dakle za $t < 0$) nalazi u osnovnom stanju i ne emituje zračenje. Poslednji integral može da se nađe u tablicama Furijeovih transformacija a može lako i da se izračuna.

Množenjem podintegralnih funkcija nalazimo:

$$\psi(\omega) = \psi'_0 \int_0^{+\infty} e^{+[i(\omega - \omega_0) - 1/\tau]t} dt \quad (8.3.29a)$$

a smenama:

$[i(\omega - \omega_0) - 1/\tau]t \rightarrow \xi, dt \rightarrow d\xi / [i(\omega - \omega_0) - 1/\tau], t \in (0, \infty) \rightarrow \xi \in (0, -\infty)$
(poslednjom smenom menja se gornja granica integraljenja jer je izraz u uglastoj zagradi negativan)

$$\psi(\omega) = \frac{\psi'_0}{i(\omega - \omega_0) - 1/\tau} \int_0^{-\infty} e^{\xi} d\xi = \frac{\psi'_0}{i(\omega - \omega_0) - 1/\tau} (0 - 1) = \frac{\psi'_0}{1/\tau - i(\omega - \omega_0)}. \quad (8.3.29b)$$

Proširivanjem razlomka sa $1/\tau + i(\omega - \omega_0)$ i sređivanjem konačno dobijamo:

$$\psi(\omega) = \psi'_0 \left(\frac{\tau}{1 + (\omega - \omega_0)^2 \tau^2} + i \frac{\tau(\omega - \omega_0)}{1 + (\omega - \omega_0)^2 \tau^2} \right). \quad (8.3.29c)$$

Raspodela amplitude zračenja u funkciji frekvencije predstavlja spektar zračenja. Dakle, našli smo da je spektar zračenja kompleksna funkcija. Ovde nas zanima samo realni (apsorpcioni) deo spektra, $S(\omega)$, pa ćemo imaginarni (disperzioni) deo ispuštiti iz analize:

$$S(\omega) = S_0 \frac{1}{1 + (\omega - \omega_0)^2 \tau^2}. \quad (8.3.30)$$

Ovaj oblik raspodele često se sreće u spektroskopiji i naziva se Lorencova linija, Slika 8.3.4. Lorencova linija ima maksimum kada je $\omega = \omega_0$, $S(\omega_0) = S_0$. Poluširinu linije na poluvisini, $\Delta\omega$, nalazimo iz uslova $S(\Delta\omega) = S_0/2$ što zamenom u (8.3.30) daje:

$$\Delta\omega = 1/\tau \quad (8.3.31)$$

znači, poluširina linije na njenoj poluvisini obrnuto je proporcionalna vremenu života pobuđenog stanja iz koga se linija emituje; skraćanje života pobuđenog stanja dovodi do širenja spektralne linije.

U vezi sa relacijom neodređenosti, širina spektralne linije u direktnoj je vezi sa neodređenošću energije pobuđenog stanja. Dakle, skraćanje života pobuđenog stanja dovodi do porasta neodređenosti njegove energije. Zaista, množenjem izraza (8.3.31) Plankovom konstantom nalazimo:

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\tau} \quad (8.3.32a)$$

gde je ΔE poluširina na poluvisini raspodele energija u pobuđenom stanju. Koristeći iste argumente kao i pre (moguća su odstupanja energije i veća od ΔE) dobijamo relaciju neodređenosti za energiju i vreme:

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{\tau} \quad (8.3.32b)$$

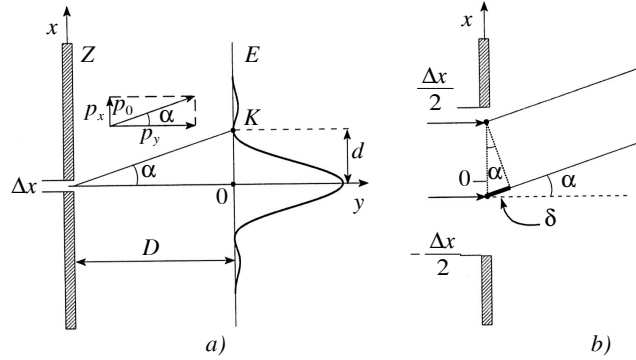
Ovaj rezultat se nešto razlikuje od ranije dobijenih relacija (8.3.17) i (8.3.23) što je posledica proizvoljnosti pri definisanju intervala u kome se lokalizuje određeni parametar. Na primer, da smo umesto poluširine na poluvisini, kao osnovni interval koristili punu širinu linije na njenoj poluvisini pojavio bi se još i faktor 2, $\tau\Delta E = 2\hbar$. Dakle, proizvoljnost u izboru osnovnog intervala daje različite rezultate koji su, međutim, u saglasnosti sa strogo izvedenom relacijom neodređenosti ($\tau\Delta E \geq \hbar/2$).

Dakle, prirodna širina spektralne linije određena je vremenom života pobuđenog stanja što je u punoj saglasnosti sa relacijom neodređenosti.

8.3.3 Difrakcija elektrona i relacija neodređenosti

Svi eksperimenti, zamišljeni ili stvarni, u kojima se ispoljava dvojna priroda materije moraju biti saglasni sa principom neodređenosti. To možda nije uvek očigledno ali detaljnijom analizom svakog takvog eksperimenta dolazi se do jednog od oblika relacije neodređenosti.

Pokazaćemo sada kako do relacije neodređenosti (8.3.1) može da se dođe analizom rasejavanja elektrona na jednom prerezu, Slika 8.3.5. Elektroni padaju u smeru y-ose na zaklon Z sa prerezom širine Δx . Prolaz elektrona kroz prerez registruje se bljeskom (scintilacijom) koji elektron izaziva pri udaru u fluorescentni ekran, E. Rasejavanjem na prerezu elektroni stvaraju difrakcionu sliku, kao što je već opisano u odeljku 8.1.3. Prema klasičnom talasnom tumačenju, rasejavanjem jednog talasa dobija se cela difrakciona slika. Novi talasi samo pojačavaju sliku koja je od početka dobijena u celini. Međutim, kada se elektroni puštaju jedan po jedan



Slika 8.3.5 Difrakcija elektrona pri prolazu kroz jedan prorez: a) šematski prikaz eksperimenta. Z je neprozirni zraklon sa prorezom širine Δx . Elektroni koji prođu kroz prorez na fluorescentnom ekranu D obrazuju difrakcionu sliku; b) geometrija rasejavanja elektrona.

vide se pojedinačni bljeskovi na ekranu, dakle, elektroni na ekran stižu kao čestice. Međutim, ako se kroz prorez propusti dovoljno veliki broj elektrona dobija se ista difrakcijska slika koju bi dali i x -zruci iste talasne dužine. To znači da se difrakcijska slika dobija kao zbirni rezultat velikog broja prispelih elektrona. Mada je „putanja” pojedinog elektrona nepredvidiva, oblik difrakcijske slike može se izračunati na osnovu poznatih parametara De Broglijevoval talasa pridruženog elektronu i geometrije eksperimentalnog uređaja.

Izaberimo dve tačke u prorezu na međusobnom rastojanju $\Delta x/2$, i nađimo uslov za destruktivnu interferenciju za talase koji prolaze kroz njih, Slika 8.3.5b. Do uzajamnog gašenja talasa koji skreću pod uglom α , dolazi kada je putna razlika među njima, δ , polubrojni umnožak talasnih dužina, $\delta = (2n - 1)\lambda/2$, gde je n ceo broj a λ talasna dužina. Sa Slike 8.3.5b nalazimo vezu između putne razlike, δ i ugla skretanja, α : $\delta = (\Delta x/2) \sin \alpha$, odakle nalazimo uslov za pojavu prvog minimuma ($n=1$) na difrakcionoj slici:

$$\frac{1}{2}\lambda = \frac{\Delta x}{2} \sin \alpha \quad (8.3.33a)$$

odnosno:

$$\lambda = \Delta x \sin \alpha. \quad (8.3.33b)$$

Svakoj tački u gornjoj polovini proreza možemo da pridružimo po jednu tačku u donjoj polovini, na rastojanju $\Delta x/2$, pa se, prema uslovu (8.3.33b) svi zruci koji prolaze kroz prorez i skreću pod uglom α , međusobno poništavaju. Dakle, položaj prvog minimuma na difrakcionoj slici određen je jednačinom (8.3.33b).

Neodređenost x -koordinate mlaza elektrona koji prolazi kroz prorez jednaka je širini proreza, Δx . Sužavanjem proreza položaj mlaza elektrona određujemo sa sve većom tačnošću. Međutim, pri konstantnoj talasnoj dužini elektrona, sužavanje proreza dovodi do porasta ugla pod kojim se nalazi prvi difrakcioni minimum, jednačina (8.3.33b). Sa čestične tačke gledišta, pojavu difrakcije elektrona možemo da

shvatimo kao međudejstvo elektrona sa ivicama proreza, u kojem elektron stiće komponentu impulsa p_x u pravcu x -ose, usled čega i skreće za mali ugao α . Pošto elektroni padaju normalno na prorez (pravac x -ose) to je prvobitna komponenta impulsa duž x ose jednaka nuli. Nakon rasejanja, elektroni koji skreću dobijaju komponentu impulsa koja je proporcionalna uglu skretanja, Slika 8.3.5a:

$$p_x = p \sin \alpha. \quad (8.3.34)$$

Prema slici na fluorescentnom ekranu, na kojem preovlađuje široka središnja svetla mrlja, može da se zaključi da najveći broj elektrona prolazi kroz prorez bez skretanja ($\alpha=0$), ali da ima i elektrona koji skreću pod uglom koji je između nula ($p_x=0$) i α , a koji odgovara položaju prvog minimuma (p_x). Neodređenost x -komponente impulsa Δp_x elektrona je, prema tome:

$$\Delta p_x = p \sin \alpha - 0 = p \sin \alpha. \quad (8.3.35)$$

Kombinujući talasnu jednačinu za difrakciju (8.3.33b) sa jednačinom za impuls skrenute čestice (8.3.34) nalazimo:

$$\frac{\lambda}{\Delta x} = \frac{\Delta p_x}{p} \quad (8.3.36)$$

odnosno:

$$\Delta x \Delta p_x = \lambda p. \quad (8.3.37)$$

Zamenom proizvoda λp iz De Brojljeve jednačine (8.1.1) nalazimo da je:

$$\Delta x \Delta p_x = h. \quad (8.3.38)$$

Uslov (8.3.38) važi samo za elektrone koji sa prvobitnog pravca skreću u prvi difrakcioni minimum. Pošto se elektroni rasejavaju i pod većim uglovima obrazujući seriju maksimuma i minimuma, još opštiji uslov je i:

$$\Delta x \Delta p_x \geq h. \quad (8.3.39)$$

Dakle, pri rasejanju elektrona na jednom prorezu, nemoguće je jednovremeno izmeriti koordinatu i komponentu impulsa elektrona duž iste koordinate.

Sada ćemo isti eksperiment razmotriti malo detaljnije i, pored relacije neodređenosti, pronaći difrakcionu sliku koja nastaje rasejavanjem elektrona na jednom prorezu. Opet posmatramo De Brojljev talas koji na prorez širine Δx (centriran oko koordinatnog početka, $\pm \Delta x/2$) pada u pozitivnom smeru y -ose, Slika 8.3.5a. Dužina proreza je mnogo veća od njegove širine pa je merljivo skretanje talasa samo u pravcu x -ose. Stoga je dovoljno da posmatramo dvodimenzioni De Brojljev talas. Tada jednačina talasa (8.1.23) postaje:

$$\Psi(x,y,t) = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p_{0,x}x + p_{0,y}y - E_0 t)}. \quad (8.3.40a)$$

Upadni talas se kreće u pravcu y-ose pa je za njega $p_{0,x} = 0$ a $p_{0,y} = p_0$. U tačku K na ekranu stiže deo talasa koji nakon prolaska kroz prorez skreće pod uglom α . Po ugledu na (8.3.40a) jednačina takvog talasa je:

$$\Psi(x,y,t) = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y - E_0 t)} \quad (8.3.40b)$$

gde je energija talasa ista kao pre skretanja, E_0 , a zbog skretanja menjaju se komponente impulsa. Dakle, zrak menja pravac ali ne menja energiju (frekvenciju). Nove komponente impulsa nalazimo projektovanjem impulsa na odgovarajuće ose. Sa Slike 8.3.5 a nalazimo, i:

$$p_x = p_0 \sin \alpha = p_0 \frac{d}{D}, \quad p_y = p_0 \cos \alpha \approx p_0 \quad (8.3.41):$$

gde je d rastojanje između tačke K i koordinatnog početka (položaja u koji pada neskretni zrak) a D rastojanje između proreza i ekrana. Pri tome smo uzeli da je ugao α dovoljno mali ($\cos \alpha \approx 1$) da možemo da zanemarimo promenu y-komponente impulsa. Zamenom impulsa iz (8.3.41) u (8.3.40b) dobijamo, i:

$$\Psi'(x,y,t) = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\frac{d}{D}p_0 x + p_0 y - E_0 t)} \quad (8.3.42)$$

Rezultujući talas u tački K dobijamo sabiranjem svih talasa po x-dimenziji proreza:

$$\Psi(d,t) = \Psi'_0 \int_{-\Delta x/2}^{\Delta x/2} e^{\frac{i}{\hbar}(\frac{d}{D}p_0 x + p_0 y - E_0 t)} dx. \quad (8.3.43a)$$

Ovaj integral možemo svesti na poznati oblik ako konstantne članove izvučemo pred integral i ako uvedemo pravougaonu funkciju koja nam omogućuje da promenimo granice integraljenja:

$$\Psi(d,t) = \Psi'_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 y - E_0 t)} \int_{-\infty}^{\infty} \Pi_{\Delta x}(x) e^{\frac{i}{\hbar} \frac{d}{D} p_0 x} dx. \quad (8.3.43b)$$

Prepoznavamo da je integral Furijeova transformacija pravougaone funkcije i po ugledu na jednačine (8.3.5) i (8.3.15) nalazimo:

$$\Psi(d,t) = \Psi''_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 y - E_0 t)} \text{sinc}\left(\frac{p_0 \Delta x}{2 \hbar D} d\right). \quad (8.3.43c)$$

Zbog jednostavnosti sve konstante koje se javljaju pri izračunavanju Furijeove transformacije ubacili smo u novi član Ψ''_0 . Dobijeni izraz predstavlja talas koji se kreće duž y-ose sa nepromenjenom energijom, E_0 , a čija amplituda je modulirana sink funkcijom. Dakle, rasejani De Brolijev talas elektrona, na fluorescentnom ekranu daje difrakcionu sliku čiji profil je kvadrat sink funkcije iz (8.3.43c):

$$S(d) = S_0 \sin^2\left(\frac{p_0 \Delta x}{2 \hbar D} d\right) \quad (8.3.44a)$$

ili izražavajući rastojanje d preko x -komponente impulsa prema jednačini (8.3.41):

$$S(p_x) = S_0 \sin^2\left(\frac{p_x \Delta x}{2 \hbar}\right). \quad (8.3.44b)$$

Već smo ranije videli da ova funkcija ima prvi par nula za vrednost argumenta $\pm\pi$, pa uzimajući kao i pre da je osnovni interval neodređenosti jednak rastojanju prve nule od centra, $S(\Delta p_x) = 0$ nalazimo:

$$\Delta p_x \Delta x = h \quad (8.3.45)$$

odnosno:

$$\Delta p_x \Delta x \geq h. \quad (8.3.46)$$

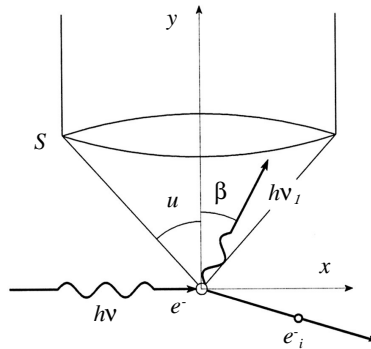
Dakle, detaljnom analizom nalazimo istu relaciju između neodređenosti impulsa i neodređenosti koordinate za elektrone koji se rasejavaju na uskom prorezu, ali smo našli i da difrakciona slika predstavlja Furijeovu transformaciju difrakcionog elementa, u ovom slučaju proreza. Kao i pre, sledi da je relacija neodređenosti posledica dvojne prirode materije.

8.3.4 Relacija neodređenosti i merenje položaja elektrona

Nemogućnost istovremenog eksperimentalnog određivanja položaja i impulsa mikroobjekta (elektrona) sa proizvoljnom tačnošću prikazaćemo zamišljenim primerom detektovanja elektrona mikroskopom. Proces detektovanja sastoji se u tome da elektron obasjavamo svetlošću određene talasne dužine λ i da detektujemo odbijeno zračenje. Biće detektovani samo oni fotoni koje elektron raseje u prostorni ugao u određen geometrijom delova uređaja, Slika 8.3.6. Tačnost određivanja položaja elektrona ograničena je veličinom koja se zove moć razlaganja mikroskopa. Ona predstavlja najmanje rastojanje Δx na kojem mogu da se nalaze dve tačke, a da se mikroskopom uočavaju kao razdvojene. Po jednačini iz optike, ovo rastojanje dato je kao:

$$\Delta x = \frac{\lambda}{\sin u}. \quad (8.3.47)$$

Neodređenost položaja elektrona Δx , biće manja ako je manja talasna dužina svetlosti λ . Fotoni svetlosti manje talasne dužine nose, međutim, veću energiju i u sudaru sa elektronom mogu da mu značajno promene impuls (Komptonov efekt). Predajući elektronu impuls p , foton skreće sa svog prvobitnog pravca kretanja krećući se pod određenim uglom β u odnosu na osu mikroskopa. Opažanje rasejanog fotona mikroskopom znači istovremeno i detektovanje elektrona. U ovom eksperimentu ugao β pod kojim foton skreće može da se odredi samo približno i u slučaju detekto-



Slika 8.3.6 Pošto je ugao β manji od aperturnog ugla u sočiva, S, dolazi do detektovanja elektrona u položaju e^- ; međutim, usled međudejstva sa fotonom elektron je promenio položaj te se stvarno nalazi u tački prostora e'^{-} .

vanja elektrona sigurno ima vrednost između vrednosti 0 i u . Zbog toga je x -komponenta impulsa fotona neodređena do vrednosti $(h\nu/c) \sin u$, gde je ν frekvencija upadnog značenja, a c brzina svetlosti. Kako je ovaj iznos impulsa elektron primio sudarom sa fotonom, izraz $(h\nu/c) \sin u$ predstavlja ujedno i neodređenost njegovog impulsa duž x -ose. Kombinovanjem ovog izraza sa (8.3.47) dobija se:

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{\lambda}{\sin u} \frac{h\nu}{c} \sin u = h.$$

Dakle, u procesu merenja položaja elektrona došlo je do neizbežne promene njegovog impulsa, koja je utoliko veća ukoliko je merenje položaja bilo tačnije.

Iz ovih primera vidimo da Hajzenbergov princip neodređenosti ima univerzalni karakter. Sve pojave u prirodi ispunjavaju ograničenja nametnuta relacijom neodređenosti, samo što značaj tog ograničenja zavisi od uslova, može da se proteže od izuzetno velikog do zanemarljivog. Osnovni kriterijum je veličina posmatranog dejstva (dejstvo = energija · vreme) u odnosu na Plankovu konstantu. Ako je dejstvo istog reda veličine onda se uticaj relacije neodređenosti neposredno ispoljava. Ako je pak dejstvo veliko u odnosu na Plankovu konstantu, tada se i relacija neodređenosti može zanemariti.

Primeri

Primer 8.3.1 Polazeći od relacije neodređenosti oceniti energiju veze elektrona u osnovnom stanju atoma vodonika kao i odgovarajuće rastojanje elektrona od jezgra.

REŠENJE:

Ukupna energija atoma vodonika, E je zbir potencijalne, U (4.2.6) i kinetičke, T , energije:

$$E = U + T.$$

Kinetičku energiju računamo po poznatom obrascu $T=(m\Delta v^2)/2$ a brzinu Δv procenjujemo iz Hajzenbergove relacije neodređenosti (8.3.10):

$$\Delta r m \Delta v \sim \frac{r}{2} m \Delta v \geq \frac{h}{4\pi}, \Delta v = \frac{h}{2\pi r m}, T = \frac{m \Delta v^2}{2} = \frac{h^2}{8\pi^2 r^2 m}. \quad (\text{P-8.3.1})$$

Pri pisanju Hajzenbergove relacije pretpostavili smo da je $\Delta r \sim r/2$ kao i $\Delta v \sim v$ (što smo i dokazali ranije ali ove pretpostavke ukazuju na to da rezultate koje dobijemo treba shvatiti kvalitativno-zato u zadatku i piše „oceniti”) kao i uvek kada pomoću opštevažećeg Hajzenbergovog principa neodređenosti pokušamo da izračunamo neku konkretnu veličinu. Hajzenbergova relacija neodređenosti pimenjena na atom vodonika veoma liči na Borov kvantni uslov (razlika je u faktoru 1/2).

Sada možemo napisati izraz za ukupnu energiju u koju ćemo uvrstiti kinetičku energiju iz (P-8.3.1) i potražiti prvi izvod ukupne energije E po r koordinati. Izjednačavanjem prvog izvoda sa nulom odredićemo vrednost r za koju energija E ima ekstremnu (minimalnu vrednost). Ovo se može dokazati ispitivanjem drugog izvoda izraza E :

$$E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} + \frac{h^2}{8\pi^2 r^2 m}, \frac{dE}{dr} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} - \frac{2h^2}{8\pi^2 m r^3} = 0 \Rightarrow r = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2}. \quad (\text{P-8.3.2})$$

Zameni ćemo sada u jednačini (P.8.3.2) brojne vrednosti za Plankovu konstantu h , masu i naelektrisanje elektrona m i e kao i električnu propustljivost vakuuma ϵ_0 i izračunati r :

$$r = \frac{8,85 \times 10^{-12} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^{-1} \times (6,63 \times 10^{-34})^2 \text{ J}^2 \text{ s}^2}{3,14 \times (1,60 \times 10^{-19})^2 \text{ C}^2 \times 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}} = \frac{3,89 \times 10^{-78}}{7,34 \times 10^{-68}} = 5,29 \times 10^{-11} \text{ m}.$$

Energiju veze osnovnog stanja (stanja sa najnižom energijom) dobićemo kada r zamenimo u izraz za ukupnu energiju:

$$\begin{aligned} E &= \frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} = \frac{9,11 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (1,60 \times 10^{-19})^4 \text{ C}^4}{8 \times (8,85 \times 10^{-12})^2 \text{ J}^{-2} \text{ C}^4 \text{ m}^{-2} (6,63 \times 10^{-34})^2 \text{ J}^2 \text{ s}^2} = \\ &= \frac{6,00 \times 10^{-106}}{2,75 \times 10^{-88} \times 1,60 \times 10^{-19}} = 13,6 \text{ eV}. \end{aligned}$$

Rezultati koje smo dobili identični su onima koje daje Borov atomski model. Uporediti a relacijama (4.2.12) i (4.2.14).

Primer 8.3.2 U Milikenovom eksperimentu za određivanje elementarnog naelektrisanja meri se vreme za koje (naelektrisane) uljane kapi pređu određeni put. Neka je kap mase $7,10 \times 10^{-15} \text{ kg}$ prešla put od $15 \pm 0,5$ podeoka za 10 sekundi (50 podeoka je 5 mm). Tačnost određivanja vremena $\Delta t = 0,1 \text{ s}$. Odrediti eksperimentalnu vrednost proizvoda neodređenosti (grešaka) impulsa i položaja čestice $\Delta x \Delta p$ i uporediti

je sa minimalnim proizvodom neodređenosti koji sledi iz Hajzenbergove relacije neodređenosti.

REŠENJE:

Neka je brzina čestice v :

$$v = \frac{x}{t} = 1,5 \text{ pod/s} = 1,5 \times 10^{-4} \text{ ms}^{-1}, \quad \frac{dv}{v} = \frac{dx}{x} + \frac{dt}{t}.$$

Prema teoriji grešaka dv možemo napisati kao Δv :

$$\Delta v = \frac{\Delta x \cdot v}{x} + \frac{\Delta t v}{t}$$

a zatim izračunati proizvod $\Delta x \Delta p$: uzimajući da je $\Delta x = 0,5 \text{ podeoka} = 5 \times 10^{-5} \text{ m}$:

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta p &= \Delta x m \Delta v = \frac{m \Delta x^2 v}{x} + \frac{m \Delta x \Delta t v}{t} \\ &= \frac{7,1 \times 10^{-15} \times (5 \times 10^{-5})^2 \times 1,5 \times 10^{-4}}{1,5 \times 10^{-3}} + \frac{7,1 \times 10^{-15} \times 5 \times 10^{-5} \times 0,1 \times 1,5 \times 10^{-4}}{10} \\ &= 2,3 \times 10^{-24} \text{ Js} = 3,9 \times 10^9 h. \end{aligned}$$

Dakle, proizvod neodređenosti položaja i impulsa, $\Delta x \Delta p$ u ovom eksperimentu mnogo je veći od minimalne vrednosti određene Hajzenbergovom relacijom.

8.4 ŠREDINGEROVA JEDNAČINA

DODATAK 8.4

D-8.4.1 Operatori

Glavnu ulogu u matematičkoj strukturi kvantne mehanike imaju operatori. Operator je simbol za primenu određene matematičke operacije na nekoj funkciji. Kada operator \hat{A} (simbolom $\hat{}$ označavamo da je A operator) primenimo na funkciju f dobija se nova funkcija ϕ :

$$\phi = \hat{A}f. \quad (\text{D-8.4.1})$$

U kvantnoj mehanici najčešće se koriste multiplikativni (specijalni slučaj je množenje konstantom) i diferencijalni operatori. Multiplikativnim operatorom x funkcija $f(x)$ prosto se množi sa x a diferencijalnim d/dx se diferencira. Kada funkcija nije diferencijabilna operator ne može delovati na nju, što znači da određeni operator ne može delovati na svaku funkciju. Zato se definiše skup funkcija na koje određeni operator deluje a takav skup se naziva oblašću definisanosti operatora.

Primer: Odrediti funkciju ϕ koja se dobija dejstvom diferencijalnog operatora d/dx na funkciju $\sin x$:

$$\phi = \frac{d}{dx} \sin x = \cos x.$$

Operatori mogu imati i vektorski oblik. Takav je operator ∇ (nabla):

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}. \quad (\text{D-8.4.2})$$

Od bitnog značaja u tekstu koji sledi biće Laplasov operator:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (\text{D-8.4.3})$$

U okviru algebre operatora uvode se određene relacije između njih:

- a) Operatori su međusobno jednaki ako imaju istu oblast definisanosti i ako delujući na istu funkciju daju isti rezultat;
- b) Operator C je suma operatora A i B kada je:

$$\hat{C} = \hat{A}f(x) + \hat{B}f(x) = \hat{B}f(x) + \hat{A}f(x);$$

- c) Proizvod operatora A i B , C definiše se kao:

$$\hat{C}f(x) = \hat{A}\hat{B}f(x) = \hat{A}[\hat{B}f(x)].$$

Na funkciju prvo deluje bliži operator (B) pa se na rezultat primeni dalji. U opštem slučaju je:

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$$

tj. operacija množenja operatora nije komutativna. Razlika:

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

naziva se komutator operatora A i B . Kada je $[A, B] = 0$ operatori komutiraju i zovu se komutirajući.

Primer: Odrediti komutator operatora x i d/dx :

$$x \frac{d}{dx} = x \frac{df}{dx}; \quad \frac{d}{dx}[xf(x)] = f(x) + \frac{df}{dx} \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dx}x - x \frac{d}{dx} = 1 + x \frac{d}{dx} - x \frac{d}{dx} = 1.$$

U kvantnoj mehanici nas gotovo isključivo interesuju linearni operatori. Operator je linearan ako delujući na proizvoljne funkcije $c_1 f_1$ i $c_2 f_2$ (c_1 i c_2 su konstante) važi:

$$\hat{L}(c_1 f_1 + c_2 f_2) = c_1 \hat{L}f_1 + c_2 \hat{L}f_2.$$

Svojstveni problem operatora

Ako se dejstvom operatora \hat{A} na funkciju f dobije ista ta funkcija pomnožena nekom konstantom a (brojem):

$$\hat{A}f = af \quad (\text{D-8.4.4})$$

funkcija f naziva se svojstvena funkcija a konstanta a svojstvena vrednost operatora \hat{A} .

Primer: Ispitati da li se dejstvom operatora $-i(d/dx)$ (i je imaginarna jedinica) na funkciju $c_1 e^{ikx}$ dobija jednačina tipa (D-8.4.4):

$$-i \frac{d}{dx}(c_1 e^{ikx}) = -i^2 k c_1 e^{ikx} = k(c_1 e^{ikx})$$

Dakle, funkcija $c_1 e^{ikx}$ je svojstvena funkcija operatora $-i(d/dx)$ dok je svojstvena vrednost realni broj k . Određeni operator može imati jednu, nekoliko ili beskonačno mnogo svojstvenih vrednosti. Skup svojstvenih vrednosti operatora naziva se spektrom (svojstvenih vrednosti). U prvom slučaju svojstvene vrednosti čine diskretan skup brojeva, u drugom one mogu imati bilo koju vrednost iz nekog kontinualnog intervala. Spektri mnogih operatora imaju kako diskretan, tako i kontinualan deo. Ako jednoj svojstvenoj vrednosti odgovara samo jedna svojstvena funkcija, svojstvena vrednost se naziva nedegenerisana. Ako istoj svojstvenoj vrednosti odgovara više od jedne svojstvene funkcije:

$$\begin{aligned} \hat{A}f_1 &= af_1 \\ \hat{A}f_2 &= af_2 \\ &\dots \\ &\dots \\ \hat{A}f_i &= af_i \end{aligned}$$

svojstvena vrednost a je degenerisana. Pri tome se pod različitim svojstvenim funkcijama podrazumevaju međusobno linearno nezavisne funkcije. Maksimalan broj linearno nezavisnih funkcija koje odgovaraju jednoj svojstvenoj vrednosti određuje stepen degeneracije date svojstvene vrednosti. Postoji teorema koja kaže da bilo koja linearna kombinacija svojstvenih funkcija koje odgovaraju istoj svojstvenoj vrednosti operatora je, takođe, svojstvena funkcija koja odgovara istoj svojstvenoj vrednosti operatora.

Ermitski operatori

Naročit značaj imaju u kvantnoj mehanici ermitski operatori jer su njihove svojstvene vrednosti realne. Operator je ermitski kada važi:

$$\int f_1^* \hat{\Omega} f_2 dx = \int (\hat{\Omega} f_1)^* f_2 dx. \quad (\text{D-8.4.5})$$

Sa f_1 i f_2 označili smo funkcije a sa $\hat{\Omega}$ operator.

D-8.4.2 Osnovni pojmovi teorije verovatnoće i matematičke statistike

Pojave nastale kao rezultat složenog uzročnog lanca događaja koji se u svim detaljima ne može poznavati nazivamo slučajnim događajima. Veličina koja određuje stepen mogućnosti dešavanja jednog događaja pod određenim uslovima naziva se verovatnoća. Verovatnoća nekog događaja procenjuje se na osnovu niza eksperimenata pri kojima taj događaj može da se realizuje (izuzetno, u izvesnim idealizovanim slučajevima može se unapred znati verovatnoća pojavljivanja nekog događaja). Neka se u nizu realizacija događaj A javi n puta; tada se broj n naziva frekvencija pojavljivanja događaja A . Odnos frekvencije n i ukupnog broja eksperimenata N je relativna frekvencija događaja A , $f(A)$:

$$f(A) = \frac{n}{N}. \quad (\text{D-8.4.6})$$

Verovatnoća pojavljivanja događaja A definiše se kao granična vrednost kojoj teži relativna frekvencija, pri beskonačnom ponavljanju eksperimenata:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n}{N} = P(A). \quad (\text{D-8.4.7})$$

Za potpun sistem događaja (A, B, \dots, L) (skup događaja od kojih se u jednom eksperimentu mora dogoditi jedan i samo jedan) je:

$$\sum_{i=A}^L f_i = 1 \quad \sum_{i=A}^L P_i = 1. \quad (\text{D-8.4.8})$$

Ako su verovatnoće nesaglasnih događaja A, B, \dots (pojava jednog isključuje pojavu drugog) $p(A)$, $p(B)$,... respektivno, tada je verovatnoća da nastupi bar jedan od njih $p(A+B+...)$:

$$P(A + B + \dots) = P(A) + P(B) + \dots \quad (\text{D-8.4.9})$$

Verovatnoća zajedničkog nastupanja međusobno nezavisnih događaja A, B, \dots jednaka je proizvodu verovatnoća svakog od tih događaja:

$$P(A, B \dots) = P(A)P(B)\dots \quad (\text{D-8.4.10})$$

Slučajnom veličinom nazivamo veličinu koja u jednoj realizaciji eksperimenata može imati samo jednu, unapred nepoznatu vrednost - to je u stvari, slučajan događaj koji ima i kvantitativan izraz (brojnu vrednost). Slučajne veličine mogu uzimati diskretne vrednosti ili bilo koju vrednost iz nekog (konačnog ili beskonačnog) intervala. Zakon raspodele slučajne veličine je zavisnost između vrednosti koje slučajna veličina može da ima i verovatnoće njihovog pojavljivanja.

Funkcija raspodele

Neka je X slučajna veličina, a x proizvoljan realan broj. Definišemo funkciju raspodele $F(x)$ kao verovatnoću da u jednom eksperimentu X uzme vrednost manju od x ;

$$F(x) = P(X < x). \quad (\text{D-8.4.11})$$

Neke osobine $F(x)$:

$$0 \leq F(x) \leq 1; \quad F(-\infty) = 0; \quad F(+\infty) = 1.$$

U slučaju kontinualne slučajne veličine X postoji nenegativna funkcija $F(x)$ takva da je:

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(x) dx \quad (\text{D-8.4.12})$$

$f(x)$ je funkcija gustine (raspodele) verovatnoće. $F(x) dx$ predstavlja verovatnoću da slučajna veličina uzme vrednost iz intervala između x i $x+dx$. Osobine funkcije $f(x)$:

$$f(x) \geq 0; \quad P(x_1 \leq X \leq x_2) = \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1. \quad (\text{D-8.4.13})$$

Brojne karakteristike slučajne veličine

Ako u nizu od n eksperimenata slučajna veličina X uzme diskretne vrednosti x_1, n_1 puta x_2, n_2 puta, ... x_i, n_i puta, definišemo srednju vrednost neke funkcije $\varphi(x_1), \langle \varphi(x_1) \rangle$:

$$\langle \varphi(x) \rangle = \frac{n_1 \varphi(x_1) + n_2 \varphi(x_2) + n_m \varphi(x_m)}{n} = \sum_{i=1}^m \varphi(x_i) f_i. \quad (\text{D-8.4.14})$$

Ako je X kontinualna slučajna veličina srednja vrednost funkcije $\varphi(x)$ je:

$$\langle \varphi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) f(x) dx. \quad (\text{D-8.4.15})$$

Kada je $\varphi(x_i) = x_i$, jednačina (D-8.4.14) definiše aritmetičku sredinu (srednju vrednost):

$$\langle x \rangle = \frac{n_1 x_1 + n_2 x_2 + n_m x_m}{n} = \sum_{i=1}^m x_i f_i. \quad (\text{D-8.4.16})$$

Kada broj eksperimenata $n \rightarrow \infty$ $f_i \rightarrow p_i$ (verovatnoći), a:

$$\langle x \rangle \rightarrow \sum_{i=1} x_i p_i = M(x). \quad (\text{D-8.4.17})$$

Veličina $M(x)$ naziva se *matematičkim očekivanjem*. Za kontinualnu slučajnu veličinu:

$$M(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} xf(x)dx. \quad (\text{D-8.4.18})$$

Rasturanje eksperimentalnih podataka oko srednje vrednosti (aritmetičke sredine) karakteriše se *disperzijom* D . Za diskretnu slučajnu veličinu:

$$D = \sum_{i=1}^m (x_i - \langle x \rangle)^2 f_i. \quad (\text{D-8.4.19})$$

Kada $n \rightarrow \infty$:

$$D = \sum_i (x_i - M)^2 p_i. \quad (\text{D-8.4.20})$$

Za kontinualnu slučajnu veličinu:

$$D = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - M)^2 f(x)dx. \quad (\text{D-8.4.21})$$

Disperzija se često izračunava na osnovu sledeće relacije:

$$\begin{aligned} D &= \sum_{i=1}^m (x_i - \langle x \rangle)^2 f_i = \sum_{i=1}^m x_i^2 f_i - 2 \langle x \rangle \sum_{i=1}^m x_i f_i + \langle x \rangle^2 \sum_{i=1}^m f_i = \\ &= \sum_{i=1}^m x_i^2 f_i - \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2. \end{aligned} \quad (\text{D-8.4.22})$$

Veličina:

$$\sigma = \sqrt{D} \quad (\text{D-8.4.23})$$

naziva se neodređenošću ili srednjom kvadratnom greškom.

Do sada smo posmatrali slobodne mikročestice i pokazali da njihovo kretanje može da se opiše De Brojljevskim ravnim talasom. Sada želimo da nademo mogućnost za proučavanje kretanja čestica u poljima različitih sila. Polazeći od prirode i osobina koje poseduju mikročestice i talasi a koje smo proučili u prethodnim poglavljima, formulišaćemo diferencijalnu jednačinu koja predstavlja osnovnu jednačinu za opisivanje pojava u mikrosvetu a koju je 1926. godine predložio Ervin Šredinger [Ervin Schrödinger (1887–1961), 1933. dobio Nobelovu nagradu za fiziku]. Šredingerova jednačina ima u kvantnoj mehanici ulogu analognu Njutnovim jednačinama u klasičnoj mehanici.

Zavisno promenljiva Šredingerove diferencijalne jednačine naziva se talasna funkcija i ona se tradicionalno obeležava sa Ψ . Talasna funkcija je u opštem slučaju funkcija koordinata, prostornih i spinskih, i često i vremena, i njome se predstavlja stanje sistema. Kada se sistem nalazi u stacionarnom stanju, talasna funkcija ne zavisi od vremena.

Talasna funkcija, koja je rešenje Šredingerove jednačine, sadrži sve podatke o sistemu. Kada je poznat oblik talasne funkcije, tada mogu da se izračunaju sve važne veličine za dati sistem, odnosno sve veličine koje u principu mogu da se mere. Ako se zna oblik talasne funkcije u početnom trenutku i polje sila, rešavanjem vremenski zavisne Šredingerove jednačine može da se odredi talasna funkcija, odnosno stanje sistema u svakom trenutku. Talasna funkcija je kompleksna funkcija te sama nema fizičko značenje. Međutim, proizvod funkcije Ψ i njoj konjugovano kompleksne funkcije Ψ^* realna je veličina kojoj se pridružuje određeni fizički smisao (gustina verovatnoće).

Kao i druge osnovne jednačine fizike (Njutnove, Maksvelove) Šredingerova jednačina se ne izvodi, već se postulira. Šredingerova jednačina je nerelativistička jednačina i može se primeniti samo na čestice koje se kreću brzinama koje su mnogo manje od brzina svetlosti. Ona, takođe, ne uzima u obzir spin.

Posmatrajmo slobodnu česticu mase m koja se kreće brzinom zanemarljivo malom u odnosu na brzinu svetlosti. Kinetička energija i impuls čestice povezani su tada jednačinom:

$$E = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2). \quad (8.4.1)$$

Potencijalna energija slobodne čestice, U , jednaka je nuli, pa je ukupna energija jednaka njenoj kinetičkoj energiji.

Prema De Brolijevoj ideji, čestici možemo da pridružimo odgovarajući talas. Uzimajući u obzir izraz (D-3.1.6), lako nalazimo vezu između čestičnih (energija E , impuls \vec{p}) i talasnih (frekvencija ω , talasni vektor \vec{k}) svojstava:

$$E = \hbar\omega, \quad |\vec{p}| = \frac{\hbar}{\lambda} = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar|\vec{k}|, \quad p_x = \hbar k_x, \quad p_y = \hbar k_y, \quad p_z = \hbar k_z. \quad (8.4.2)$$

Zamenom komponenti impulsa iz (8.4.2), u (8.4.1) nalazimo vezu između frekvencije i talasnog broja De Brolijevog talasa:

$$\omega = \frac{\hbar}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (8.4.3)$$

Međutim, ova jednačina nam ništa ne govori o obliku De Brolijevog talasa odnosno o promeni talasa kada na česticu deluje neka sila. Da bismo našli tu vezu, i jedinačinu De Brolijevog ravnog talasa (8.1.23):

$$\Psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)} \quad (8.4.4)$$

izražavamo preko talasnog broja i frekvencije:

$$\Psi = A e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}. \quad (8.4.5)$$

Sada tražimo zavisnost talasne funkcije od vremena i prostornih koordinata kada se čestica nađe u polju neke spoljašnje sile. Diferenciranjem funkcije (8.4.5) jednom po vremenu:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega \Psi, \quad \omega = -\frac{1}{i\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (8.4.6)$$

i dva puta po koordinatama:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= (i)^2 k_x^2 \Psi = -k_x^2 \Psi \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} &= -k_y^2 \Psi, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -k_z^2 \Psi \end{aligned}$$

dobijamo:

$$k_x^2 = -\frac{1}{\Psi} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}, \quad k_y^2 = -\frac{1}{\Psi} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2}, \quad k_z^2 = -\frac{1}{\Psi} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}. \quad (8.4.7)$$

Uvrštavanjem izraza za ω iz (8.4.6) i k_x^2 , k_y^2 i k_z^2 iz (8.4.7) u jednačinu (8.4.3) dobijamo *vremenski zavisnu Šredingerovu jednačinu za slobodnu česticu*:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right). \quad (8.4.8)$$

Ovo je parcijalna diferencijalna jednačina prvog reda po vremenu i drugog reda po koordinatama. Ovakve jednačine se najlakše rešavaju metodom razdvajanja promenljivih. Rešenje tražimo u obliku proizvoda dve funkcije od kojih jedna zavisi samo od vremena, a druga samo od koordinata:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)f(t). \quad (8.4.9)$$

Tada su izvodi po vremenu i koordinatama:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \psi \frac{df}{dt} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= f \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = f \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = f \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}. \end{aligned} \quad (8.4.10)$$

Zamenom dobijenih diferencijala u jednačinu (8.4.8), dobijamo:

$$-\frac{\hbar}{i} \psi \frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} f \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right). \quad (8.4.11)$$

Podelimo jednačinu (8.4.11) sa Ψf :

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right). \quad (8.4.12)$$

Leva strana (8.4.12) sadrži funkciju f koja zavisi samo od vremena, a desna funkciju Ψ zavisnu od prostornih koordinata. Kako su vreme i prostorne koordinate međusobno nezavisne promenljive, jednakost leve i desne strane biće zadovoljena samo ako su one jednake nekoj konstanti koju ćemo obeležiti sa E :

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = E \quad (8.4.13)$$

odnosno:

$$\frac{df}{f} = -\frac{iE}{\hbar} dt. \quad (8.4.14)$$

Jednačina (8.4.14) može lako da se integriše:

$$\int \frac{df}{f} = -\frac{iE}{\hbar} \int dt \Rightarrow \ln f = -\frac{i}{\hbar} Et + \ln C$$

odnosno:

$$f = C e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \quad (8.4.15)$$

gde je C konstanta integraljenja. Dobili smo, naravno, istu zavisnost talasne funkcije od vremena kao u (8.4.5) jer se na početku i zahtevalo da rešenje Šredingerove diferencijalne jednačine bude funkcija De Brolijevog talasa. Upoređivanjem (8.4.15) i (8.4.5) vidimo da je konstanta razdvajanja koju smo (ne slučajno) označili sa E , zaista jednaka energiji čestice.

Izjednačavanjem desnog dela jednačine (8.4.12) sa konstantom E dobijamo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) = E$$

a množenjem jednačine sa Ψ i uvođenjem Laplasovog operatora:

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

dobijamo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = E \Psi. \quad (8.4.16)$$

Jednačina (8.4.16) predstavlja stacionarnu Šredingerovu jednačinu za slobodnu česticu. Kako je u ovom slučaju potencijalna energija čestice U jednaka nuli, E predstavlja istovremeno i kinetičku i ukupnu energiju čestice.

Stacionarnu Šredingerovu jednačinu (8.4.16) uopštimo za slučaj kada se čestica kreće u polju sile. Čestica ukupne energije E , koja je prema uslovu (8.4.13) konstantna, u polju spoljašnje sile stiče potencijalnu energiju, U . Tada je njena kinetička energija jednaka razlici ukupne i potencijalne, $E - U$, što zamenom u jednačinu (8.4.16) daje:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi = E\Psi. \quad (8.4.17)$$

Time smo dobili opšti oblik *stacionarne Šredingerove jednačine*. Kada potencijalna energija U ne zavisi eksplicitno od vremena, što je slučaj koji će nas isključivo interesovati, vremenska zavisnost talasne funkcije je i za česticu u potencijalnom polju data jednačinom (8.4.15), pri čemu E kao i pre predstavlja ukupnu energiju.

Vremenski zavisna Šredingerova jednačina za česticu čija je potencijalna energija U je:

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi. \quad (8.4.18)$$

U poređenju s izrazom (8.4.8) poslednja jednačina ima dodatni član kojim se opisuje uticaj spoljašnjih sila na kretanje čestice. Međutim, zbir članova na desnoj strani predstavlja ukupnu energiju čestice jer član sa Laplasovim operatorom odgovara kinetičkoj energiji.

Šredingerova jednačina je po svojoj matematičkoj strukturi parcijalna diferencijalna jednačina u kojoj se javljaju prvi parcijalni izvod funkcije Ψ po vremenu i drugi izvodi funkcije Ψ po prostornim koordinatama. Šredingerova jednačina se često naziva i **talasna jednačina** iako njena formalna sličnost sa talasnom diferencijalnom jednačinom (D-3.1.14), čije je jedno rešenje jednačina ravnog talasa (D-3.1.13) nije potpuna. Naime, Šredingerova jednačina je parcijalna diferencijalna jednačina prvog reda po vremenu i drugog po koordinatama dok je talasna diferencijalna jednačina drugog reda i po vremenu i po koordinatama. Zato je u formalnom pogledu Šredingerova jednačina sličnija npr., diferencijalnoj jednačini iz klasične fizike koja opisuje difuziju čestica u prostoru i vremenu. Sa druge strane, stacionarna Šredingerova jednačina (8.4.16) ima oblik jednačine stojećih talasa. Prema tome, u svim slučajevima kada nas interesuje prostorna zavisnost talasne funkcije, naziv talasna je sasvim odgovarajući. Inače, izraz **talasna funkcija** za funkcije koje su rešenja Šredingerove jednačine je svuda u širokoj upotrebi.

U opštem slučaju, talasna funkcija Ψ je kompleksna funkcija, pa joj zbog toga nije moguće pripisati fizički smisao. Međutim, proizvod funkcije Ψ i njoj konjugovano kompleksne funkcije Ψ^* je realna funkcija:

$$\Psi\Psi^* = \left(\Psi^* e^{+\frac{i}{\hbar}Et}\right)\left(\Psi e^{\frac{i}{\hbar}Et}\right) = \Psi\Psi^* \quad (8.4.19)$$

kojoj se može dati fizički smisao.

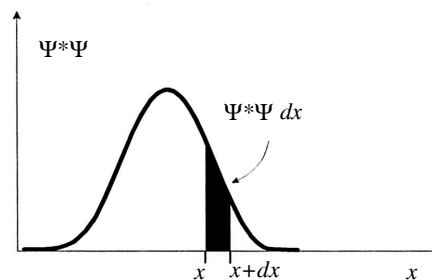
8.4.1 Bornovo tumačenje talasne funkcije

Statističko tumačenje talasne funkcije Ψ predložio je Maks Born (Max Born, 1882–1970, za istraživanja u kvantnoj mehanici a naročito za njenu intepretaciju dobija 1954. godine Nobelovu nagradu za fiziku). Potrebno je, međutim, istaći bitnu razliku između statističkog koncepta u klasičnoj i kvantnoj mehanici. U klasičnoj fizici statistički pristup se koristi iz praktičnih razloga – za sisteme s ogromnim brojem čestica nemoguće je poznavati početne koordinate i impulse svih čestica. U kvantnoj mehanici mora se pribеći statističkim predstavama jer postoji ograničenje mogućnosti poznavanja početnih koordinata i momenata koje je sadržano u relaciji neodređenosti. Kvantna mehanika je suštinski statistička disciplina – ona u principu daje iskaze o verovatnoćama i kada je reč o sistemima sa malim brojem čestica.

Originalno Šredingerovo tumačenje talasne funkcije, Ψ , zasniva se na pretpostavci o stvarnosti postojanja talasa materije. Čestica, na primer, elektron, „razmazana” je u prostoru, a funkcija $\Psi(x, y, z, t)$ je povezana sa gustinom „elektronskog oblaka” u tački sa koordinatama (x, y, z) i u trenutku t . Sama talasna funkcija, pošto je najčešće kompleksna, nije pogodna za opisivanje funkcije gustine (koja mora biti realna). Umesto talasne funkcije gustini se pridružuje proizvod $\Psi\Psi^*$ koji je realna funkcija. Međutim, ovakvo tumačenje talasne funkcije, nailazi na teškoće pri opisivanju višestičinih sistema. Na primer, talasna funkcija za dve čestice određena je u šestodimenzionom prostoru i nemoguće joj je pridružiti stvarne talase materije u smislu originalne Šredingerove ideje.

Born je 1926. godine predložio da se proizvod $\Psi\Psi^*$ proglasi **funkcijom gustine verovatnoće** i ovakvo tumačenje talasne funkcije predstavlja jedan od **postulata** kvantne mehanike. Tako je u jednodimenzionom slučaju, Slika 8.4.1, verovatnoća nalaženja čestice u intervalu $(x, x + dx)$, u trenutku t određena je proizvodom:

$$\Psi^*(x,t) \Psi(x,t)dx.$$



Slika 8.4.1 Bornovo tumačenje talasne funkcije u jednoj dimenziji. Proizvod $\Psi^*\Psi dx$ predstavlja verovatnoću da se čestica nađe u intervalu dx u okolini tačke sa koordinatom x .

Slično, u trodimenzionom slučaju, verovatnoća nalaženja čestice u elementu zapremine $dx dy dz$ data je proizvodom:

$$\Psi^*(x,y,z) \Psi(x,y,z) dx dy dz. \quad (8.4.20)$$

Proizvod $\Psi^*\Psi$ označava verovatnoću po jediničnoj zapremini (u jednodimenzionom slučaju po jediničnoj dužini), dakle, predstavlja gustinu verovatnoće; ima dimenzije recipročne zapremine (dužine). Verovatnoća nalaženja čestice u elementu zapremine $dx dy dz$ dobija se kada se $\Psi^*\Psi$ pomnoži zapreminom elementa. U konačnoj zapremini, V , verovatnoću nalaženja čestice nalazimo sabiranjem verovatnoća za elementarne zapremine, tj., integraljenjem izraza (8.4.20) po celoj zapremini V :

$$p_V = N^2 \int_V \Psi^* \Psi dx dy dz \quad (8.4.21a)$$

gde je N konstanta normiranja. Problem normiranja se javlja otuda što je $N\Psi$ jednako dobro rešenje Šredingerove jednačine kao i samo Ψ . Međutim, konstantu normiranja lako izračunavamo na osnovu toga što znamo da nalaženju čestice bilo gde u prostoru, odgovara siguran događaj, koji po definiciji ima jediničnu verovatnoću:

$$N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx dy dz = 1 \quad (8.4.21b)$$

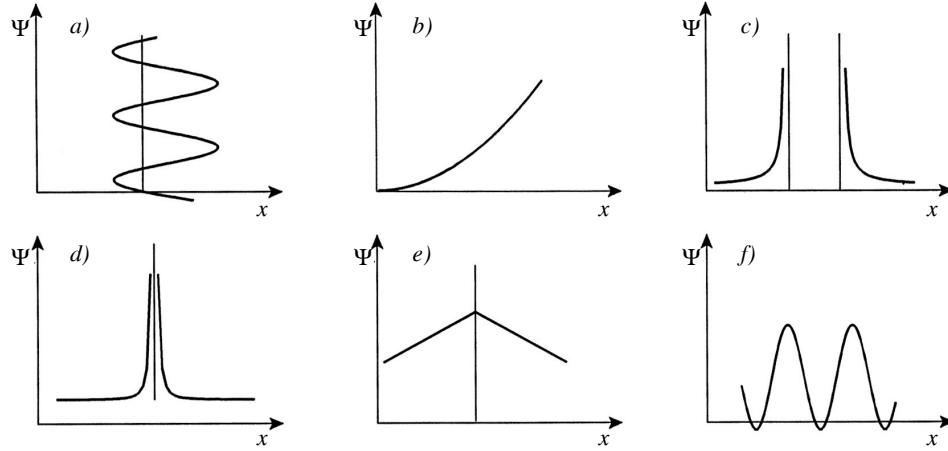
odakle rešavanjem po N nalazimo:

$$N = \frac{1}{\sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx dy dz}}. \quad (8.4.21c)$$

Jednačina (8.4.21b) označava **uslov normiranja talasne funkcije**.

Bornovim tumačenjem koje je izraženo jednačinom (8.4.21a) posredno se postavljaju zahtevi o matematičkoj prirodi talasne funkcije. Talasna funkcija mora da bude **jednoznačna**, jer jedna čestica ne može da ima različite verovatnoće nalaženja u istoj tački prostora, Slika 8.4.2a. Iz uslova normiranja sledi da talasna funkcija mora da bude **konačna** u konačnom delu prostora jer integral (8.4.21a) mora da bude konačan u svim delovima prostora, Slika 8.4.2b i 8.4.2c. Međutim, talasna funkcija može da liči na Dirkovu δ -funkciju, tj., da ima jako veliku vrednost u veoma malom delu prostora a da pri tome vrednost integrala $\Psi^*\Psi$ po tom vrlo malom delu prostora bude konačna, Slika 8.4.2d. Ovakva talasna funkcija odgovara čestici koja ima tačno određen položaj u prostoru.

Kako je Šredingerova jednačina diferencijalna jednačina drugog reda po koordinatama, to talasna funkcija Ψ i njen prvi izvod moraju da budu neprekidni da bi drugi izvod uopšte postojao, Slika 8.4.2f. U izvesnim slučajevima uslov da prvi izvod talasne funkcije mora da je, takođe, neprekidna funkcija nije matematički strogo ispunjen. Na primer, na granici dve oblasti koordinata potencijal, a time i talasna funkcija, mogu da imaju skokovitu promenu. Ovo je slučaj kod čestice u pravaougaoj jami, o čemu će u sledećim poglavljima biti više reči.



Slika 8.4.2 Primeri različitih funkcija: a) višeznačna; b) neograničena; c) neograničena u određenom opsegu; d) neograničena u jednoj tački; e) funkcija sa prelomom; f) neprekidna funkcija.

8.4.2 Svojstvene funkcije i svojstvene vrednosti

Vratimo se sada stacionarnoj Šredingerovoj jednačini (8.4.17):

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

Levu stranu ove jednačine možemo da shvatimo kao niz instrukcija za izvršenje određenih matematičkih operacija nad talasnom funkcijom Ψ . Treba, dakle, da se odrede drugi izvodi funkcije Ψ po koordinatama (Laplasov operator) i da se pomnože sa $-\hbar^2/(2m)$, a ovaj rezultat treba sabrati sa proizvodom talasne funkcije i potencijalne energije U . Desna strana Šredingerove jednačine je jednostavno proizvod talasne funkcije Ψ i nekog određenog broja (vrednosti energije E). Niz instrukcija s leve strane Šredingerove jednačine predstavlja kvantnomehanički operator ukupune energije i obično se obeležava sa H :

$$\hat{H} = (E)_{op} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U}(r). \quad (8.4.22)$$

\hat{U} je oznaka operatora potencijalne energije. Koristeći prethodnu jednačinu, vremenski nezavisnu Šredingerovu jednačinu napisaćemo na sledeći način:

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (8.4.23)$$

dok vremenski zavisna Šredingerova jednačina ima oblik:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad (8.4.24)$$

Rešavanje jednačine (8.4.23) odnosno (8.4.24) sastoji se u nalaženju partikularnih rešenja Ψ_n koja zadovoljavaju određene granične uslove. Takve funkcije Ψ_n nazivaju se **svojstvene funkcije** operatora H , a energija E naziva se **svojstvena vrednost** operatora energije. Sama Šredingerova jednačina predstavlja, dakle, u matematičkom smislu svojstveni problem operatora energije.

Skup svojstvenih vrednosti naziva se **spektar svojstvenih vrednosti**. On može da bude diskretan i kontinualan. Ako određenoj svojstvenoj vrednosti odgovara samo jedna svojstvena funkcija (pri tome treba da se ima na umu da se svojstvene funkcije koje se razlikuju samo za stalni činilac smatraju identičnim), ta svojstvena vrednost naziva se **nede degenerisanom**. Svojstvena vrednost, kojoj odgovaraju dve ili više linearno nezavisnih svojstvenih funkcija, je **degenerisana**.

Ako se sistem može nalaziti u stanjima koje opisujemo funkcijama $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ koje su svojstvene funkcije istog operatora (pri istoj svojstvenoj vrednosti), onda se stanje sistema može opisati i funkcijom $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots$ koje je linearna kombinacija funkcija ψ_1, ψ_2 . Takva funkcija, takođe, je svojstvena funkcija istog operatora. Linearnom kombinacijom talasnih funkcija izražavamo princip *superpozicije*.

Prema postulatu kvantne mehanike, dinamičkim promenljivim kao što su koordinata, impuls, moment impulsa, energija, pridružuju se, tako da uzajamno zadovoljavaju određene komutacione jednačine, kvantnomehantički operatori. Za svaki od ovih operatora mogu da se napišu jednačine svojstvenih vrednosti slične izrazu (8.4.23):

$$\hat{\Omega}\psi = \omega\psi \quad (8.4.25)$$

gde su ψ svojstvene funkcije operatora $\hat{\Omega}$, a ω njegove svojstvene vrednosti. Kako su dinamičke promenljive veličine koje, uopšte uzevši, mogu da se mere, svojstvene vrednosti ω moraju da budu realne. Kvantnomehantičke operatore prikazujemo (kao i u slučaju operatora energije) u tzv. koordinatnom predstavljanju (postoje i drukčija predstavljanja, npr. impulsno). U ovom predstavljanju koordinatama položaja x, y i z pridružuju se operatori položaja x, y i z koje jednostavno tumačimo kao „pomnožiti sa x ”. Komponentama impulsa p_x, p_y, p_z pridružuju se operatori:

$$\hat{p}_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (8.4.26)$$

Operator impulsa možemo formalno da odredimo pomoću poznatog operatora energije H , jednačina (8.4.22). Kada je potencijalna energija U jednaka nuli, energija E je samo kinetička (T):

$$p_x^2 = 2mE; \quad \hat{p}_x^2 = 2m(\hat{T}) = 2m \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \Rightarrow \hat{p}_x = \pm \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}.$$

Od dve moguće vrednosti za \hat{p}_x uzima se ona sa pozitivnim znakom.

Kvantnomehantički operatori drugih važnih dinamičkih promenljivih dobijaju se tako što se ove veličine izraze preko koordinata i impulsa, koji se zatim zamene odgovarajućim operatorima.

Tako se, momentu impulsa \vec{l} pridružuje operator momenta impulsa \vec{l}_{op} :

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{bmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{bmatrix} \rightarrow \vec{l}_{op} = \frac{\hbar}{i} \begin{bmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (8.4.27)$$

a komponentama momenta impulsa l_x , l_y i l_z pridružuju se operatori:

$$\begin{aligned} l_x &= yp_z - zp_y \rightarrow \hat{l}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ l_y &= zp_x - xp_z \rightarrow \hat{l}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ l_z &= xp_y - yp_x \rightarrow \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (8.4.28)$$

Postulatom kvantne mehanike definiše se srednja vrednost ili očekivana vrednost operatora [videti relacije (D-8.4.15) i (D-8.4.18)], kao i disperzija rezultata merenja neke dinamičke promenljive sistema, koju ćemo označiti sa Ω kada se njeno merenje ponovi mnogo puta. Pomnožimo prvo (8.4.25) funkcijom ψ^* (koja je konjugovano kompleksna funkciji ψ) i integralimo po čitavom prostoru:

$$\omega = \frac{\int \psi^* \hat{\Omega} \psi dV}{\int \psi^* \psi dV}. \quad (8.4.29)$$

Prema jednačini (8.4.29) se kao rezultat preciznog merenja dinamičke promenljive Ω kada je ψ svojstvena funkcija operatora Ω dobija vrednost ω . Kada je, međutim, sistem u stanju ψ , pri čemu je ψ dobijena npr. rešavanjem svojstvenog problema (8.4.23) ali nije svojstvena funkcija operatora Ω , kvantnomehničkim postulatom se definiše očekivana vrednost operatora (ili srednja vrednost) $\langle \Omega \rangle$:

$$\langle \Omega \rangle = \frac{\int \psi^* \hat{\Omega} \psi dV}{\int \psi^* \psi dV}. \quad (8.4.30)$$

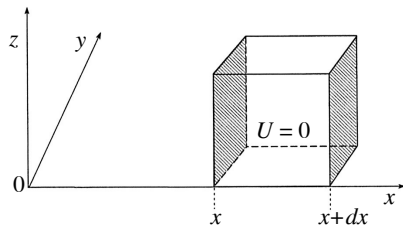
Kada je npr. operator Ω jednak operatoru impulsa tada se izračunavanjem desne strane jednačine (8.4.30) dobija srednja vrednost impulsa čestice za stanje ψ . Disperzija rezultata merenja [videti i (D-8.4.21)] dobija se iz relacije:

$$\langle (\Omega - \langle \Omega \rangle)^2 \rangle = \frac{\int \psi^* (\hat{\Omega} - \langle \Omega \rangle)^2 \psi dV}{\int \psi^* \psi dV}. \quad (8.4.31)$$

8.4.3 Struja gustine verovatnoće

DODATAK 8.4

D-8.4.3 Jednačina kontinuiteta



Slika D-8.4.1 Uz fluks gustine verovatnoće.

Pokazaćemo u tekstu koji sledi da funkcija gustine verovatnoće zadovoljava neku vrstu jednačine kontinuiteta koja nam je poznata iz mehanike fluida. Podsetićemo se sada u pojednostavljenom vidu o čemu je tu reč.

Uzmimo zapreminu u obliku kocke. Neka su ivice kocke postavljene duž koordinantih osa, x , y i z . Slika D-8.4.1 Pustimo da u ovu zapreminu utiče tečnost i to paralelno x -osi. Gustinu struje (fluksa) tečnosti označićemo sa:

$$\vec{s}(x, y, z) = s_x(x, y, z) \vec{i}.$$

Ako je kocka dovoljno mala, tada $s_x(x, y, z)$ može da se smatra stalnim duž cele stranice kocke. Količina tečnosti koja utiče kroz levu stranu kocke, u jedinici vremena je:

$$s_x(x, y, z) dy dz. \quad (D-8.4.24)$$

Količina tečnosti koja ističe kroz desnu stranu kocke je:

$$-s_x(x + dx, y, z) dy dz \quad (D-8.4.25)$$

ili približno:

$$-s_x(x + dx, y, z) dy dz = -s_x(x, y, z) dy dz - \frac{\partial s_x(x, y, z)}{\partial x} dx dy dz. \quad (D-8.4.25a)$$

Promena količine tečnosti unutar zapremine jednaka je algebarskom zbiru izraza (D-8.4.24) i (D-8.4.25a):

$$s_x(x) dy dz - s_x(x) dy dz - \frac{\partial s_x(x, y, z)}{\partial x} dx dy dz = -\frac{\partial s_x(x, y, z)}{\partial x} dx dy dz. \quad (D-8.4.26)$$

Ako bismo posmatrali proticanje tečnosti u pravcu y -ose [$\vec{s}(x, y, z) = s_y(x, y, z) \vec{j}$] odnosno z -ose [$\vec{s}(x, y, z) = s_z(x, y, z) \vec{k}$] promena količine tečnosti iznosila bi:

$-\partial s_y / \partial x dx dy dz$, odnosno $-\partial s_z / \partial z dx dy dz$, saglasno izrazu (D-8.4.26). U opštem slučaju gustinu struje tečnosti koja protiče u proizvoljnom pravcu prikazaćemo vektom-

rom: $\vec{s}(x, y, z) = s_x(x, y, z)\vec{i} + s_y(x, y, z)\vec{j} + s_z(x, y, z)\vec{k}$, pa bi u tom slučaju promena količine tečnosti unutar zapremine iznosila $-\nabla \cdot \vec{s}$, gde je ∇ vektorski operator:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}.$$

Ako se ukupna količina tečnosti održava (a to je slučaj kada unutar zapremine nema ni izvora ni ponora), promena količine tečnosti koja nastaje, jednačina (D-8.4.26) mora da se nadoknadi promenom gustine ρ :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz \quad (\text{D-8.4.27})$$

što ćemo napisati na sledeći način:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial s_x}{\partial x} = 0 \quad (\text{D-8.4.28})$$

za slučaj prostiranja fluida u pravu x-ose i:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{s} = 0 \quad (\text{D-8.4.28a})$$

u opštem slučaju. Jednačine (D-8.4.28) i (D-8.4.28a) predstavljaju jednačine kontinuiteta.

Pomoću funkcije gustine verovatnoće $\Psi^*\Psi$ može da se odredi verovatnoća nalaženja čestice u nekoj zapremini V . Nekada nas, međutim, zanima broj čestica koje prolaze kroz neku površinu u jedinici vremena ili fluks čestica. Naslućujemo da bi određena kombinacija funkcija gustine verovatnoće mogla da se poveže i sa fluksom čestica. U proračunu koji je izveo Maks Born može da se pokaže da funkcija $\Psi\Psi^*$ ostaje stalna i da eventualni višak $\Psi\Psi^*$ koji nastaje u nekom trenutku i na nekom mestu mora da se nadoknadi manjkom $\Psi\Psi^*$ na nekom drugom mestu. Pokazaćemo sada da funkcija gustine verovatnoće zadovoljava jednačinu po obliku analognu jednačini kontinuiteta [videti jednačinu (D-8.4.28) i (D-8.4.28a)] koja nam je poznata iz mehanike fluida.

Izvešćemo sada ovu jednačinu. Napisaćemo prvo vremenski zavisnu Šredingerovu jednačinu (8.4.18):

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U\Psi \quad (\text{8.4.32})$$

i njoj odgovarajuću jednačinu čije je rešenje konjugovano kompleksna funkcija Ψ^* :

$$+\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^* + U\Psi^*. \quad (\text{8.4.33})$$

Prvu jednačinu (8.4.32) ćemo pomnožiti sa $-\Psi^*$, a drugu (8.4.33) sa Ψ , a zatim ih sabrati:

$$+\frac{\hbar}{i}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)=\frac{\hbar^2}{2m}(\Psi^*\Delta\Psi-\Psi\Delta\Psi^*)$$

ili u jednodimenzionom slučaju:

$$+\frac{\hbar}{i}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right).$$

Prethodni izraz možemo da napišemo i u obliku:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)+\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)\right]=0. \quad (8.4.34)$$

Sada možemo da uporedimo jednačinu (8.4.34) sa jednačinom kontinuiteta (D-8.4.28). Jednačina (8.4.34) ima istu strukturu kao hidrodinamička jednačina, s tim što ulogu gustine ρ ima funkcija $\Psi^*\Psi$ dok izraz:

$$S=-\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right) \quad (8.4.35)$$

predstavlja **struju gustine** verovatnoće. Ovom veličinom označavamo verovatnoću da čestica u jednoj sekundi prođe kroz površinu u smeru pozitivne normale na tu površinu. U opštijem, trodimenzionom slučaju, jednačina održanja (8.4.34) može da se napiše i u sledećem obliku:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)+\nabla\cdot\vec{S}=0 \quad (8.4.36)$$

pri čemu bi sada \vec{S} predstavljao vektor struje gustine verovatnoće:

$$\vec{S}=-\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*). \quad (8.4.37)$$

Ako se izraz (8.4.36) integriše po nekoj zapremini V , dobija se:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V\Psi^*\Psi\,dV=-\int_V\nabla\cdot\vec{S}\,dV=-\oint_A\vec{S}\cdot d\vec{A} \quad (8.4.38)$$

gde je $d\vec{A}$ površinski element koji je jednak veličini površine dA , a usmeren je isto kao i pozitivna normala na tu površinu. Dakle, integral vektora \vec{S} po površini A daje verovatnoću prolaska čestice kroz tu površinu u jedinici vremena. Desni deo jed-

načine (8.4.38) dobijen je primenom Stoksove (George Stokes, 1819-1903, engleski fizičar i matematičar) jednačine pomoću koje trostruki integral po zapremini V može da se zameni površinskim integralom po zatvorenoj površini koja obavića zapreminu V .

Integral jednačine (8.4.34) između koordinata x_1 i x_2 , glasi:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{x_1}^{x_2} (\Psi^* \Psi) dx \right] = \frac{i\hbar}{2m} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \right] dx = S(x_1) - S(x_2). \quad (8.4.39)$$

Kako smo formalno pokazali ranije, jednačina (8.1.29), kretanje čestice u pravcu x -ose sa impulsom p (takođe u pravcu x -ose) i amplitudom Ψ_0 , može da se prikaže De Brolijjevim talasom:

$$\Psi = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}.$$

Napišimo sada konjugovano kompleksnu funkciju ovoj funkciji:

$$\Psi^* = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Et - px)}.$$

Izračunajmo zatim struju gustine verovatnoće:

$$\begin{aligned} \Psi^* \Psi &= \Psi_0^2; \quad \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p \Psi^* \Psi; \quad \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} = -\frac{i}{\hbar} p \Psi^* \Psi \Rightarrow \\ S &= -\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) = \frac{p}{m} \Psi_0^2 = v \Psi_0^2. \end{aligned} \quad (8.4.40)$$

Jednačinom (8.4.40) pokazali smo to da struja gustine verovatnoće ili verovatnoća da čestica prođe kroz neku površinu zavisi i od brzine kretanja čestice, što se moglo i očekivati. U sledećem poglavlju, pri određivanju koeficijenata propustljivosti različitih barijera vrtićemo se ponovo na izraz (8.4.39) odnosno na struju funkcije gustine verovatnoće.

8.5 STACIONARNA ŠREDINGEROVA JEDNAČINA

DODATAK 8.5

D-8.5.1 Dirakova delta funkcija

δ (delta) funkciju (Dodatak D-8.2), uveo je P. Dirak (Paul Adrien Maurice Dirac, 1902-1984, bitno doprineo razvoju kvantne mehanike i kvantne elektrodinamike, podelio sa E. Šredingerom Nobelovu nagradu za fiziku 1933). Delta (δ) funkcija definiše se kao:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ \infty & x = 0 \end{cases} \quad (\text{D-8.5.1})$$

i:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (\text{D-8.5.2})$$

Jedno od najvažnijih svojstava δ funkcije, koje, naravno, matematički može da se dokaže, je:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0). \quad (\text{D-8.5.3})$$

Prethodni izraz može da se napiše u obliku:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a) f(x) dx = f(a) \quad (\text{D-8.5.4})$$

Podsetimo se na to da se svaka funkcija $f(x)$ može razviti u Furijeov red:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) e^{ikx} dk \quad (\text{D-8.5.5})$$

dok se koeficijenti razvoja dobijaju iz jednačine:

$$a(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (\text{D-8.5.6})$$

δ -funkcija, takođe, može da se razvije u Furijeov red:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} dk \quad (\text{D-8.5.7})$$

a koeficijent $a(k)$ je:

$$a(k) = \frac{1}{2\pi}. \quad (\text{D-8.5.8})$$

8.5.1 Mlaz elektrona

Posmatrajmo mlaz elektrona čija je kinetička energija E i koji se kreće brzinom $v (= \sqrt{2E/m})$ u pravcu ose x . U ovom slučaju potencijalna energija U čestice (elektrona) jednaka je nuli, pa stacionarna Šredingerova jednačina glasi:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0. \quad (8.5.1)$$

Jednačina (8.5.1) je standardna diferencijalna jednačina drugog reda čije rešenje tražimo u obliku $\psi = e^{rx}$. Zamenjivanjem pretpostavljenog rešenja i njegovog drugog izvoda u (8.5.1), dobija se karakteristična kvadratna jednačina:

$$r^2 + \frac{2m}{\hbar^2}E = 0$$

koja ima dva kompleksna korena:

$$r_{1/2} = \pm \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} = \pm ik; \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Pošto se elektron slobodno kreće, sa impulsom \vec{p} u pravcu x -ose, njegova energija je kinetička, pa važi:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m\lambda^2}.$$

Impuls elektrona p u navedenoj jednačini zamenili smo (prema De Brolijevoj jednačini) količnikom \hbar/λ gde je λ De Brolijeva talasna dužina pridružena elektronu koji se kreće brzinom v . Sada rešenja karakteristične jednačine dobijaju oblik:

$$r_{1/2} = \pm \frac{2\pi i}{\lambda} = \pm \frac{i}{\hbar} p$$

pa diferencijalna jednačina (8.5.1) ima dva rešenja, ψ_1 i ψ_2 :

$$\psi_1 = A e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} x} = A e^{\frac{i}{\hbar} p x} = A e^{\frac{2\pi i}{\lambda} x}; \quad \psi_2 = B e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} x} = B e^{-\frac{i}{\hbar} p x} = B e^{-\frac{2\pi i}{\lambda} x}. \quad (8.5.2)$$

A i B su konstante normiranja. Funkcije ψ_1 i ψ_2 su neprekidne i konačne u celom opsegu za bilo koju, pozitivnu vrednost energije E . U ovom slučaju spektar svojstvenih vrednosti energije je kontinualan. Kako postoje dva rešenja Šredingerove jednačine za istu vrednost energije, stanje može da se smatra i dvostruko degenerisanim.

Da bismo razumeli poreklo ove degeneracije, napisaćemo operator impulsa, jednačina (8.4.26) i odredićemo rezultat njegovog delovanja na funkcije ψ_1 i ψ_2 :

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}. \quad (8.5.3)$$

U jednačinama koje slede umesto p_x pišaćemo samo p , podrazumevajući da je reč o impulsu čestice koja se kreće u pravcu x -ose. Primenimo prvo operator impulsa na funkciju ψ_1 :

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_1 = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \left(A e^{\frac{i}{\hbar} p x} \right) = p \psi_1 \quad (8.5.4)$$

a zatim na talas ψ_2 :

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_2 = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \left(B e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \right) = -p \psi_2. \quad (8.5.5)$$

Vidimo da jednačine (8.5.4) i (8.5.5) imaju oblik jednačine svojstvenih vrednosti jer se dejstvom operatora na funkciju dobija ista ta funkcija pomnožena nekom konstantom. Možemo, takođe, da zaključimo da su svojstvene funkcije operatora energije istovremeno i svojstvene funkcije operatora impulsa, ali tako da svojstvenoj funkciji ψ_1 odgovara svojstvena vrednost $+p$, a svojstvenoj funkciji ψ_2 odgovara svojstvena vrednost $-p$. To znači da dve talasne funkcije ψ_1 i ψ_2 odgovaraju stanjima čestice istog intenziteta impulsa ali suprotnog smera kretanja, Slika 8.5.1. To dalje znači da se pomoću znaka u eksponentu talasne funkcije određuje smer kretanja čestice duž određene ose.

Posmatrajmo sada funkciju ψ koja je linearna kombinacija funkcija ψ_1 i ψ_2 :

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 = A e^{\frac{i}{\hbar} p x} + B e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \quad (8.5.6)$$

sa ciljem da utvrdimo da li je i funkcija ψ svojstvena funkcija operatora impulsa. Rešenje $\psi(x)$, jednačina (8.5.6.) uz pomoć Ojlerove formule:

$$e^{\pm i\rho} = \cos \rho \pm i \sin \rho$$

može da se napiše u trigonometrijskom obliku:

$$\psi(x) = C \cos kx + D \sin kx; \quad k = \frac{i}{\hbar} p \quad (8.5.7)$$

pri čemu su konsantne C i D povezane sa A i B iz jednačine (8.5.1) sledećim vezama:

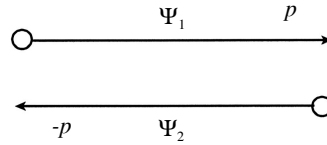
$$C = A + B; \quad D = i(A - B).$$

Neka je D u jednačini (8.5.8) jednako 0, što znači da je $\psi = C \cos kx$. Ispitaćemo sada dejstvo operatora impulsa na ovu funkciju:

$$\hat{p}\psi = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}(C \cos kx) = -\frac{k\hbar}{i} C \sin kx. \quad (8.5.8)$$

Poslednja jednačina nema oblik jednačine svojstvenih vrednosti jer se dejstvom operatora **ne** dobija ista ta funkcija (pomnožena nekim činiocem), pa ovakva funkcija nije svojstvena funkcija operatora impulsa, te, prema tome, ne predstavlja određeno stanje čestice sa određenim impulsom p . Pokušajmo da rastumačimo i zašto. Napisaćemo funkciju $\cos kx$ kao zbir dva člana:

$$\psi = C \cos kx = \frac{1}{2} C e^{ikx} + \frac{1}{2} C e^{-ikx}. \quad (8.5.9)$$



Slika 8.5.1 Talasne funkcije kod linearnog kretanja.

Funkcija ψ izražena jednačinom (8.5.9) predstavlja kombinaciju ili bolje rečeno slaganje (superpoziciju) dva stanja. Jedno stanje odgovara kretanju čestice udesno, a drugo predstavlja kretanje čestice ulevo.

Podvucimo da se kod funkcija sa kontinualnim spektrom svojstvenih vrednosti kao u ovom slučaju dobija:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi \cdot \psi^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A e^{\frac{i}{\hbar} p x} \cdot A e^{-\frac{i}{\hbar} p x} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A^2 dx \rightarrow \infty \quad (8.5.10)$$

zbog čega talasna funkcija mora da se normira na poseban način. U ovakvim slučajevima obično se vrši normiranje na tzv. δ -funkciju. Može da se zapazi da integral proizvoda talasnih funkcija ima oblik δ -funkcije razvijene u Furijeov red:

$$A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} dx \propto \delta(p-p) \propto \delta(0). \quad (8.5.11)$$

Razvoj δ funkcije razvijene u Furijeov red ima oblik:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk \quad (8.5.12)$$

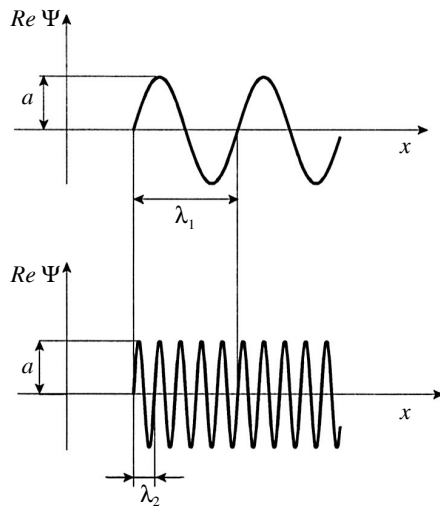
pa se upoređivanjem jednačina (8.5.11) i (8.5.12) dolazi do vrednosti konstante normiranja A :

$$A^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} = \frac{1}{h} \quad (8.5.13)$$

a talasna funkcija (odnosno svojstvena funkcija operatora impulsa) ψ konačno ima oblik:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{h}} e^{\frac{i}{\hbar} px}. \quad (8.5.14)$$

Na Slici 8.5.2 prikazana je zavisnost realnog dela funkcije ψ od koordinate x , jednačina (8.5.2). Period ove oscilatorne funkcije jednak je De Broglijevoj talasnoj dužini koja je pridružena elektronu, $\lambda = (h/p)$. Na Slici 8.5.2 prikazana su dva slučaja: u prvom, elektroni se kreću sa impulsom p , a u drugom slučaju njihov impuls je pet puta veći u odnosu na prethodni.



Slika 8.5.2 Realni deo rešenja Šredingerove jednačine za mlaz elektrona koji se slobodno kreće duž x -ose: (gore) mlaz sa impulsom p ; (dole) mlaz sa impulsom $5p$.

8.5.2 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru: energija čestice E je veća od potencijalne energije barijere U , $E > U$

Posmatrajmo česticu, na primer, elektron koji, krećući se u pozitivnom smeru x -ose kroz oblast I, nailazi u tački $x = 0$ na oblast II, Slika 8.5.3. U oblasti I ($x \leq 0$) potencijalna energija U čestice jednaka je nuli, pa je ukupna energija E čestice jednaka njenoj kinetičkoj energiji. U okolini tačke $x = 0$, pod dejstvom polja sile, potencijalna energija (ili potencijal) čestice se menja skokovito do neke stalne vred-

nosti U za $x \geq 0$. Slikovito rečeno, oblast II predstavlja potencijalnu barijeru (prepreku) za česticu. Kako ukupna energija mora da se održava (a ona je zbir kinetičke i potencijalne energije), sledi da u oblasti II čestica ima kinetičku energiju $T = E - U$. Izračunaćemo sada verovatnoću da čestica koja dolazi s leve strane ($U = 0$) prođe kroz potencijalnu barijeru, odnosno da se odbije od nje i da se vrati nazad. Napisaćemo stacionarne Šredingerove jednačine za oblasti I i II:

$$\text{I: } \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2}E\Psi = 0; \quad -\infty < x \leq 0 \quad (8.5.15)$$

$$\text{II: } \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2}(E - U)\Psi = 0; \quad 0 \leq x < +\infty. \quad (8.5.16)$$

Kao i u prethodnom primeru za svaku od diferencijalnih jednačina (8.5.15) i (8.5.16) dobijamo po dva rešenja. Kao rešenje uzimamo, međutim, njihovu linearnu kombinaciju koja je, saglasno svojstvu slaganja (superpozicije) koje ove diferencijalne jednačine imaju, takođe rešenje:

$$\text{I: } \Psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}; \quad -\infty < x \leq 0, \quad k_1 = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2mE} \quad (8.5.17)$$

$$\text{II: } \Psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}; \quad 0 \leq x < \infty, \quad k_2 = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2m(E - U)}. \quad (8.5.18)$$

U jednačinama (8.5.17) i (8.5.18) A_1, B_1, A_2 i B_2 su konstante a i imaginarna jedinica. Izraz:

$$A_1 e^{ik_1 x}$$

predstavlja tzv. upadni talas Ψ_u ili talas koji se kreće u pozitivnom smeru x -ose u oblasti I, pre nailaska na barijeru. Talas reflektovan barijerom Ψ_r , kreće se u negativnom smeru x -ose, pa njemu odgovara drugi član jednačine (8.5.17):

$$B_1 e^{-ik_1 x}.$$

Izraz:

$$A_2 e^{ik_2 x}$$

predstavlja talas koji se kreće u pozitivnom smeru x -ose u oblasti II i to je talas koji je prošao kroz barijeru. Talas koji bi se u oblasti II kretao zdesna nalevo prikazali bismo jednačinom:

$$B_2 e^{-ik_2 x}.$$

Ovaj talas nema fizičkog smisla i zato je konstanta $B_2 = 0$. Prema tome, talasna funkcija Ψ_2 iz (8.5.18) postaje:

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x}. \quad (8.5.19)$$

Koristeći sličnost iz optike možemo da kažemo da se upadni talas pri nailasku na granicu dveju sredina deli na reflektovani i propušteni talas. Izračunaćemo sada koeficijente propustljivosti T i refleksije R . Koeficijent propustljivosti predstavlja deo ukupnog broja čestica koji prolazi u oblast II, dok koeficijent refleksije predstavlja deo čestica koje barijera odbija unazad. Zbir koeficijenta propustljivosti i refleksije mora da bude jednak jedinici. U jednom stacionarnom stanju, struja gustine verovatnoće mora da bude stalna jednačina (8.4.35). Zato, logično, i sledi da struja gustine verovatnoće u sredini I, S_I , mora da bude jednaka struji gustine verovatnoće u sredini II, S_{II} . Izračunaćemo sada, na osnovu jednačine (8.4.35), struju gustine verovatnoće u sredini I i u sredini II.

$$S_I(x) = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi_1^* \frac{\partial \psi_1}{\partial x} - \psi_1 \frac{\partial \psi_1^*}{\partial x} \right). \quad (8.5.20)$$

Uzimajući u obzir da je funkcija ψ_1 određena jednačinom (8.5.17), a da je njoj konjugovana funkcija:

$$\psi_1^*(x) = A_1 e^{-ik_1 x} + B_1 e^{ik_1 x}$$

dobija se za struju gustine verovatnoće u svakoj tački x sredine, I, izraz:

$$S_I = \frac{\hbar k_1}{m} (A_1^2 - B_1^2) = v_1 A_1^2 - v_1 B_1^2. \quad (8.5.21)$$

Kako je funkcija ψ_2 data izrazom (8.5.19), a njoj konjugovana funkcija je:

$$\psi_2^*(x) = A_2 e^{-ik_2 x}$$

struja gustine verovatnoće u svakoj tački sredine II iznosi:

$$S_{II} = \frac{\hbar k_2}{m} A_2^2 = v_2 A_2^2 \left(k_2 = \frac{mv_2}{\hbar} \right). \quad (8.5.22)$$

U stacionarnom stanju je $S_I = S_{II}$, pa se dobija:

$$v_1 A_1^2 - v_1 B_1^2 = v_2 A_2^2 \quad (8.5.23)$$

v_1 i v_2 su brzine kretanja čestica u sredinama I i II. Kada jednačinu (8.5.23) podelimo proizvodom $v_1 A_1^2$ koji označava upadnu struju gustine verovatnoće, dobijamo:

$$\frac{B_1^2}{A_1^2} + \frac{v_2 A_2^2}{v_1 A_1^2} = R + T = 1 \Rightarrow T = \frac{v_2 A_2^2}{v_1 A_1^2}; \quad R = \frac{B_1^2}{A_1^2}. \quad (8.5.24)$$

Kako i sledi iz jednačine (8.5.24) koeficijent propustljivosti zavisi od odnosa brzina čestice u dvema sredinama kroz koje se prostiru upadni i propušteni talas. Upadni i reflektovani talas prostiru se samo kroz sredinu I, pa u koeficijentu refleksije zavisnost od brzine ne postoji. Prema tome, da bismo izračunali udeo propuštenih odnosno reflektovanih čestica, treba da odredimo količnik konstanti B_1 i A_1 odnosno A_2 i A_1 . Ove konstante odredićemo iz uslova neprekidnosti talasne funkcije i njenih izvoda na granicama intervala:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0); \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0). \quad (8.5.25)$$

Iz (8.5.17) i (8.5.19) odmah dobijamo:

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= A_1 + B_1 \\ \psi_2(0) &= A_2. \end{aligned}$$

Da bismo iskoristili drugi deo uslova (8.5.25) treba da odredimo izvode talasnih funkcija:

$$\begin{aligned} \psi_1'(x) &= ik_1 A_1 e^{ik_1 x} - ik_1 B_1 e^{-ik_1 x} \\ \psi_2'(x) &= ik_2 A_2 e^{ik_2 x}. \end{aligned}$$

Na granici oblasti I i II:

$$\begin{aligned} \psi_1'(0) &= ik_1 A_1 - ik_1 B_1 \\ \psi_2'(0) &= ik_2 A_2. \end{aligned}$$

Uslovi (8.5.25) dobijaju sada svoj posebni oblik:

$$A_1 + B_1 = A_2 \quad (8.5.26)$$

$$ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = ik_2 A_2. \quad (8.5.27)$$

Eliminišući A_2 iz (8.5.26) i (8.5.27), nalazimo vezu između koeficijenata B_1 i A_1 :

$$B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_1.$$

Kako smo ranije istakli, odnos koeficijenata B_1 i A_1 dignut na kvadrat daje udeo čestica koje barijera reflektuje, što je koeficijent refleksije. Kako se vidi $(B_1/A_1)^2$, jednako je odnosu kvadrata modula reflektovanog i upadnog talasa:

$$\begin{aligned} R &= \frac{\psi_r \psi_r^*}{\psi_u \psi_u^*} = \frac{B_1 e^{ik_1 x} B_1 e^{-ik_1 x}}{A_1 e^{-ik_1 x} A_1 e^{ik_1 x}} = \\ &= \left(\frac{B_1}{A_1} \right)^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - U/E}}{1 + \sqrt{1 - U/E}} \right)^2. \end{aligned} \quad (8.5.28)$$

R se naziva koeficijent refleksije. Koeficijent propustljivosti T koji daje udeo čestica koje prolaze kroz barijeru je:

$$T = 1 - R = 4 \frac{k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 4 \frac{\sqrt{1 - U/E}}{(1 + \sqrt{1 - U/E})^2}. \quad (8.5.29)$$

Na osnovu jednačine (8.5.28) i (8.5.29) možemo da izačunamo udeo čestica sa energijom E koje bivaju reflektovane barijerom, odnosno čestica koje prolaze kroz barijeru energije U . Za različite vrednosti odnosa U/E izračunati su koeficijenti refleksije R i koeficijenti propustljivosti T , a ovi rezultati prikazani su u Tabeli 8.5.1.

Tabela 8.5.1. Koeficijent refleksije i propustljivosti za različite vrednosti E/U , gde je E energija čestice, a U potencijalna energija barijere.

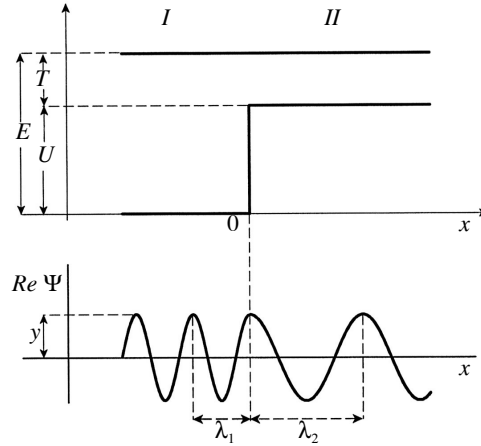
U/E	R	T
0,1	0,0007	0,9993
4	0,0161	0,9839
6	0,0507	0,9493
0,8	0,1459	0,8541
0,9	0,2700	0,7300
0,95	0,4026	0,5974
0,99	0,8182	0,1818

Rezultati koji slede iz (8.5.28) i (8.5.29) bitno se razlikuju od onih koje očekujemo na osnovu zakona klasične fizike. Klasična čestica koja ima energiju veću od visine barijere, sigurno bi prošla u oblast II, što označavamo sa $T = 1$ i $R = 0$. Iz prethodnih jednačina, međutim, vidimo da uvek postoji određena verovatnoća da se čestica reflektuje – osim u slučaju da visina barijere $U \rightarrow 0$ ili kada bi čestica imala beskonačno veliku energiju, $E \rightarrow \infty$, $R \rightarrow 0$ odnosno $T \rightarrow 1$.

Na Slici 8.5.3 prikazan je realni deo funkcije $\Psi(x)$ koja je dobijena kao rešenje Šredingerovih jednačina (8.5.15) i (8.5.16). Kao što se vidi, barijera ne utiče na amplitudu funkcije. Kako čestica u sredinama I i II ima različite kinetičke energije E i $E - U$, redom, to se i De Broglijeve talasne dužine čestice u sredinama I i II razlikuju. Tako je: $\lambda_I < \lambda_{II}$ jer je $p_I > p_{II}$ pošto iz De Broglijeve jednačine sledi da je $\lambda_I = h/p_I = h/\sqrt{2mE}$ a $\lambda_{II} = h/\sqrt{2m(E - U)}$.

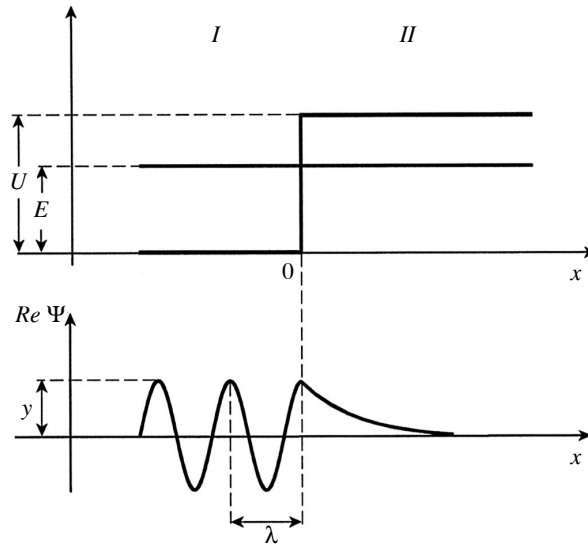
8.5.3 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru: energija čestice E manja je od potencijalne energije barijere U , $E < U$

Posmatrajmo kretanje čestice (elektrona) u pozitivnom smeru x -ose, pri čemu čestica iz oblasti I nailazi u tački $x = 0$ na oblast II, Slika 8.5.4. U oblasti I ($x \leq 0$) potencijalna energija čestice jednaka je nuli, pa je energija E čestice po svom obliku kinetička. U oblasti II ($x \geq 0$) potencijalna energija čestice menja se skokovito do neke stalne vrednosti U , pri čemu je sada $U > E$. Klasična mehanika ne predviđa mogućnost da čestica proдре u oblast II sleva nadesno. Naime, jednakost ukupnih



Slika 8.5.3 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru – ukupna energija čestice E veća je od visine barijere U , $E > U$. Pošto se impuls čestice smanjio usled prolaska kroz barijeru, smanjila se učestanost odnosno povećao se period talasne funkcije, pri čemu je amplituda y ostala ista.

energija čestice u oblasti I i u oblasti II mogla bi u ovom slučaju da bude zadovoljena samo kada bi bile moguće negativne vrednosti kinetičkih energija [$E = U + (-T_{II})$]. Kako je ovo nemoguće, nemoguće je i da čestica proдре kroz potencijalnu barijeru. Ispitaćemo sada šta predviđa kvantna mehanika u ovom slučaju.



Slika 8.5.4 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru; energija čestice E manja je od potencijalne energije barijere U . Barijera „priгуšuje” talas, pa se amplituda talasa y asimptotski približava nuli.

Napisaćemo Šredingerove jednačine koje se odnose na stanje čestice u oblasti I i II:

$$\text{I: } \frac{d^2 \psi_1}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E \psi_1 = 0; \quad -\infty < x \leq 0 \quad (8.5.30)$$

$$\text{II: } \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2}(E - U)\psi_2 = 0; \quad 0 \leq x < +\infty. \quad (8.5.31)$$

Rešenja ovih jednačina su:

$$\text{I: } \psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}; \quad -\infty < x \leq 0, \quad k_1 = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2mE} \quad (8.5.32)$$

$$\text{II: } \psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}; \quad 0 \leq x < \infty, \quad k_2 = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2m(U - E)}. \quad (8.5.33)$$

Kao i u prethodnom poglavlju sa $\psi_u = A_1 e^{ik_1 x}$ označićemo upadni talas, a sa $\psi_r = B_1 e^{-ik_1 x}$ reflektovani talas. Priroda rešenja u oblasti II sada je drukčija – kako je $U > E$, talasna funkcija za $x > 0$ nema oscilatorni već eksponencijalni oblik. Da bi funkcija ψ_2 bila konačna za sve vrednosti x -koordinate, moramo da izaberemo $A_2 = 0$ (inače bi $\psi_2 \rightarrow \infty$ kada $x \rightarrow \infty$). Prema tome, u oblasti II talasna funkcija ima eksponencijalno opadajući oblik:

$$\psi_2(x) = B_2 e^{-k_2 x}. \quad (8.5.34)$$

Koeficijente refleksije R i propustljivosti T nalazimo kao u slučaju kad je $U < E$:

$$\psi_1(0) = A_1 + B_1$$

$$\psi_2(0) = B_2.$$

Izvodi funkcija ψ_1 i ψ_2 su:

$$\psi_1'(x) = ik_1 A_1 e^{ik_1 x} - ik_1 B_1 e^{-ik_1 x}; \quad \psi_1'(0) = ik_1 A_1 - ik_1 B_1$$

$$\psi_2'(x) = -k_2 B_2 e^{-k_2 x}; \quad \psi_2'(0) = -k_2 B_2.$$

Uslovi neprekidnosti talasne funkcije i njenih izvoda na granici oblasti I i II glase:

$$A_1 + B_1 = B_2$$

$$ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = -k_2 B_2.$$

Uklanjanjem B_2 iz ovih jednačina nalazimo:

$$A_1(ik_1 + k_2) = B_1(ik_1 - k_2).$$

Koeficijent refleksije odredićemo, kao i ranije, iz jednačine:

$$R = \frac{\Psi_{1r}\Psi_{1r}^*}{\Psi_{1u}\Psi_{1u}^*} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{B_1 B_1^*}{A_1 A_1^*} = \frac{ik_1 + k_2}{ik_1 - k_2} \frac{ik_1 - k_2}{ik_1 + k_2} = 1. \quad (8.5.35)$$

Koeficijent propustljivosti $T=1 - R=0$. Ovakav rezultat mogao je odmah da se dobije i proračunom vrednosti struje gustine verovatnoće u sredini II pomoću jednačine (8.4.35). S obzirom na oblik funkcije Ψ_2 , jednačine (8.5.34), ovaj fluks mora da bude jednak nuli. Dobili smo rezultat koji se na prvi pogled uopšte ne razlikuje od klasičnog: čestica koja ima energiju E manju od visine potencijalne barijere, potpuno se reflektuje pri nailasku na barijeru. Pa ipak, postoji jedna bitna razlika. Gustina verovatnoće nalaženja čestice u oblasti II nije jednaka nuli, što znači da čestica može da se nađe i unutar oblasti koja je za nju, prema klasičnoj mehanici, nedostupna. Ako nađemo kvadrat modula funkcije Ψ_2 :

$$\Psi_2 \Psi_2^* = B_2^2 e^{-2k_2 x} = B_2^2 e^{-\frac{4\pi}{h} \sqrt{2m(U-E)}x} \quad (8.5.36)$$

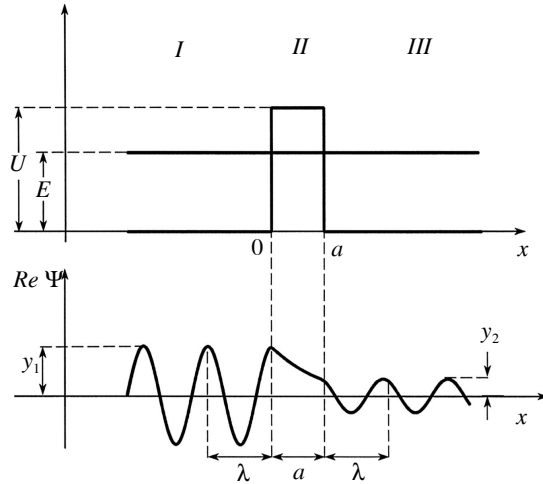
koji određuje verovatnoću nalaženja čestice na rastojanju x od granice oblasti I i II, vidimo da postoji određena, konačna verovatnoća da se čestica nađe i s desne strane barijere. Brzina opadanja funkcije gustine verovatnoće, jednačina (8.5.36) zavisi od mase čestice koja prodire kroz barijeru, kao i od razlike visine barijere i ukupne energije čestice. Obično se kao dubina prodiranja uzima rastojanje od granice oblasti I i II do tačke x na kojoj talasna funkcija Ψ_2 [jednačina (8.5.34)] opadne na $1/e$ -ti deo njene vrednosti u tački $x = 0$. Rezultat (8.5.36) nije u suprotnosti sa rezultatom (8.5.35) – čestica se potpuno reflektuje ($T = 0$), ali ne obavezno na samoj granici oblasti I i II.

Na Slici 8.5.4 prikazan je realni deo talasne funkcije $\psi(x)$, koja je rešenje Šredingerove jednačine (8.5.30) i (8.5.31). U oblasti I talasna funkcija ima oscilatornu prirodu, dok u oblasti II eksponencijalno opada. Kažemo da barijera prigušuje talas.

8.5.4 Prolaz čestice sa energijom E kroz pravougaonu jednodimenzionu potencijalnu barijeru U konačne širine a , $E < U$

Neka na česticu u okolini tačke $x = 0$ deluje polje sile koje prouzrokuje promenu potencijala od vrednosti nula do neke konstantne vrednosti U . U okolini tačke a dolazi, opet zbog dejstva sile, do promene potencijala od vrednosti U do nule. Ogranično područje konstantnog pozitivnog potencijala, oblasti II ($0 \leq x \leq a$), Slika 8.5.5, naziva se potencijalna prepreka (barijera) konačne širine. U skladu sa tim, čestica koja se kreće sa energijom E u pozitivnom smeru x -ose, ima u oblastima I ($x \leq 0$) i III ($x \geq a$) potencijalnu energiju nula, a u oblasti II ($0 \leq x \leq a$), njena potencijalna energija je U pri čemu je $U > E$. Šredingerove jednačine za oblast I, II i III glase:

$$\text{I: } \frac{d^2 \Psi_1}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E \Psi_1 = 0; \quad -\infty < x \leq 0 \quad (8.5.37)$$



Slika 8.5.5 Prolaz čestice koja ima energiju E kroz barijeru čija su potencijalna energija U i širina a , na osnovu rešenja (8.5.40) – (8.5.42). Amplituda talasne funkcije smanjuje se unutar barijere (prigušenje talasa), ali to ne utiče na period (frekvenciju) talasne funkcije u prostoru iza barijere.

$$\text{II: } \frac{d^2 \Psi_2}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \Psi_2 = 0; \quad 0 \leq x \leq a \quad (8.5.38)$$

$$\text{III: } \frac{d^2 \Psi_3}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E \Psi_3 = 0; \quad a \leq x < +\infty. \quad (8.5.39)$$

Rešenja prethodnih jednačina su:

$$\text{I: } \Psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}; \quad -\infty < x \leq 0, \quad k_1 = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2mE} \quad (8.5.40)$$

$$\text{II: } \Psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}; \quad 0 \leq x \leq a, \quad k_2 = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2m(U - E)} \quad (8.5.41)$$

$$\text{III: } \Psi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x}; \quad a \leq x < +\infty. \quad (8.5.42)$$

Član $B_3 e^{-ik_1 x}$, koji bi odgovarao kretanju čestice u oblasti III zdesna nalevo u (8.5.42) je izostavljen. Uslovi neprekidnosti funkcije i njenih izvoda na granicama intervala su:

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0); \quad \Psi_1'(0) = \Psi_2'(0)$$

$$\Psi_2(a) = \Psi_3(a); \quad \Psi_2'(a) = \Psi_3'(a).$$

Iz ovih uslova sledi:

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \quad (8.5.43)$$

$$ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2 \quad (8.5.44)$$

$$A_2 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a} = A_3 e^{ik_1 a} \quad (8.5.45)$$

$$k_2 A_2 e^{k_2 a} - k_2 B_2 e^{-k_2 a} = ik_1 A_3 e^{ik_1 a}. \quad (8.5.46)$$

Koeficijent propustljivosti, odnosno deo ukupnog broja čestica koji prode kroz barijeru, jednak je odnosu kvadrata amplituda funkcije $\psi_3(x)$ i dela funkcije $\psi_1(x)$ koji opisuje kretanje sleva nadesno. Napomenimo da otpada zavisnost koeficijenta propustljivosti od brzine čestice jer su brzine čestica u sredinama I i III jednake:

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}. \quad (8.5.47)$$

Pomoću (8.5.43) – (8.5.46) izračunaćemo količnik A_3/A_1 . Uvedimo sledeće smene:

$$\frac{A_3}{A_1} = w; \quad \frac{A_2}{A_1} = y; \quad \frac{B_1}{A_1} = z; \quad \frac{B_2}{A_1} = t.$$

Sada sistem jednačina (8.5.43) – (8.5.46) ima oblik:

$$1 + z = y + t \quad (8.5.48)$$

$$ik_1 - ik_1 z = k_2 y - k_2 t \quad (8.5.49)$$

$$ye^{k_2 a} + te^{-k_2 a} = we^{ik_1 a} \quad (8.5.50)$$

$$k_2 ye^{k_2 a} - k_2 te^{-k_2 a} = ik_1 we^{ik_1 a}. \quad (8.5.51)$$

Ako jednačinu (8.5.48) pomnožimo sa ik_1 pa saberemo sa (8.5.49), dobijamo:

$$2ik_1 = y(k_2 + ik_1) + t(ik_1 - k_2). \quad (8.5.52)$$

Kada jednačinu (8.5.50) pomnožimo sa ik_1 i oduzmemo od (8.5.51) dobija se:

$$y(k_2 - ik_1)e^{k_2 a} = t(ik_1 + k_2)e^{-k_2 a}. \quad (8.5.53)$$

Uklanjanjem nepoznate t iz jednačina (8.5.52) i (8.5.53), dobijamo y :

$$y = \frac{2ik_1 e^{-k_2 a} (ik_1 + k_2)}{e^{-k_2 a} (k_2 + ik_1)^2 - e^{k_2 a} (k_2 - ik_1)^2}. \quad (8.5.54)$$

Sada i iz jednačina (8.5.50) i (8.5.51) uklonimo t da bismo dobili w u zavisnosti od y . S tim ciljem (8.5.50) množimo sa k_2 i dobijeni proizvod oduzimamo od (8.5.51):

$$w = \frac{2k_2 e^{k_2 a}}{(k_2 + ik_1)e^{ik_1 a} y}.$$

Ako sada u gornju jednačinu uvrstimo izraz za y iz (8.5.54), dobijamo:

$$w = \frac{A_3}{A_1} = \frac{4ik_1k_2e^{-ik_1a}}{e^{-k_2a}(k_2+ik_1)^2 - e^{k_2a}(k_2-ik_1)^2}.$$

Uvodeći funkcije sinus hiperbolički i kosinus hiperbolički, definisane jednačinama:

$$sh(k_2a) = \frac{e^{k_2a} - e^{-k_2a}}{2}; \quad ch(k_2a) = \frac{e^{k_2a} + e^{-k_2a}}{2}$$

možemo w da predstavimo u obliku:

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{2ik_1k_2e^{-ik_1a}}{(k_1^2 - k_2^2)sh(k_2a) + 2ik_1k_2ch(k_2a)}. \quad (8.5.55)$$

Izraz konjugovan ovome je:

$$\left(\frac{A_3}{A_1}\right)^* = \frac{-2ik_1k_2e^{ik_1a}}{(k_1^2 - k_2^2)sh(k_2a) - 2ik_1k_2ch(k_2a)}. \quad (8.5.56)$$

Koeficijent propustljivosti jednak je proizvodu jednačina (8.5.55) i (8.5.56):

$$\left(\frac{A_3}{A_1}\right)\left(\frac{A_3}{A_1}\right)^* = \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 sh^2(k_2a) + 4k_1^2k_2^2 ch^2(k_2a)}.$$

Kako je:

$$ch^2x - sh^2x = 1$$

konačno se dobija:

$$T = \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2 sh^2(k_2a) + 4k_1^2k_2^2}. \quad (8.5.57)$$

Ovaj izraz je dosta složen i nepogodan za analizu. Možemo da ga znatno uprostimo ako se koristimo činjenicom da je u najvećem broju slučajeva:

$$sh(k_2a) \approx \frac{1}{2}e^{k_2a}.$$

Pokažimo ovo na jednom tipičnom primeru. Neka je čestica koju posmatramo elektron, $E - U = 150 \text{ eV}$, dok je $a = 10^{-10} \text{ m}$ (0,1 nm). Tada je:

$$k_2a = \frac{\sqrt{8\pi^2m(U-E)}}{h}a = \frac{\sqrt{8 \cdot 8,314^2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 150 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}}{6,6 \cdot 10^{-34}} 10^{-10} = 6,28;$$

$$\operatorname{sh}(6, 28) = \frac{e^{6,28} - e^{-6,28}}{2} = 266,893; \quad \frac{e^{k_2 a}}{2} = 266,894.$$

Ako sada $\operatorname{sh}(k_2 a)$ zamenimo sa $e^{(k_2 a)}/2$, dobijamo:

$$T = \frac{4k_1^2 k_2^2}{\frac{1}{4}(k_1^2 + k_2^2)^2 e^{2k_2 a} + 4k_1^2 k_2^2} = \frac{4}{\frac{1}{4}\left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1}\right)^2 e^{2k_2 a} + 4}.$$

Kako su konstante k_1 i k_2 istog reda veličine, a broj 4 može da se zanemari u realnim slučajevima u odnosu na $\exp(k_2 a)$, izraz za T može da se napiše u približnom obliku:

$$T \approx e^{-2k_2 a} = e^{-\frac{4\pi}{h} \sqrt{2m(U-E)}a}. \quad (8.5.58)$$

Prema tome, propustljivost barijere, koja ima konačnu širinu a , i u slučaju kada je energija čestice E manja od potencijalne energije U , različita je od nule i može da se u najvećem broju slučajeva izračuna iz jednačine (8.5.58). U Tabeli 8.5.2 date su vrednosti za propustljivost barijere T , pri različitim širinama barijere a , i za stalnu vrednost razlike $U-E$. Kao što vidimo, za barijeru širine 1 \AA propustljivost je prilično velika (10%), ali sa povećanjem širine barijere propustljivost eksponencijalno opada. Naglasimo da je prema zakonima klasične fizike, propustljivost barijere, u svim slučajevima kada je $E - U < 0$, jednaka nuli.

Tabela 8.5.2 Koeficijent propustljivosti barijere izračunat po formuli (8.5.58) za različite debljine barijere pri $U-E=5 \text{ eV}$

$a \text{ (nm)}$	0.10	0.13	0.15	0.18	0.20	0.50	1.00
T	0,100	0,051	0,032	0,016	0,010	$1,04 \times 10^{-6}$	$1,07 \times 10^{-10}$

8.5.5 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru: trodimenzioni slučaj sa sfernom simetrijom

Trodimenziona Šredingerova jednačina u pravouglom koordinatnom sistemu, jednačina (8.4.17) ima oblik:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + [E - U(r)] \psi = 0. \quad (8.5.59)$$

U jednačini smo naznačili da potencijalna energija U zavisi samo od koordinate r , odnosno da je ona sferno simetrična. Ovo je čest slučaj u atomskoj fizici, jer Kulonova sila, koja je preovlađujuća u atomskoj fizici, ima sferno simetrični potencijal. Funkcija ψ , u opštem slučaju zavisi od svih koordinatnih x , y i z ili, ako bismo prešli na sferne koordinate, zavisi od sfernih koordinata r , θ i φ . [O svemu ovome

biće reči detaljnije u poglavlju 9; videti jednačine (9.1.22)]. Postoje, međutim, slučajevi, kada je i talasna funkcija sferno simetrična i ne pokazuje zavisnost od uglova θ i φ ili nas u prvoj aproksimaciji zanima samo zavisnost talasne funkcije od r koordinate.

Sada ćemo jednačinu (8.5.59) da prevedemo u sferne koordinate ali ćemo se ograničiti na sferno simetrični slučaj. To znači da ćemo u izrazu za Laplasov operator, jednačina (9.1.28), da zanemarimo izvode talasne funkcije ψ po uglovima i zadržaćemo se na izrazu:

$$\Delta\psi = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(r\psi). \quad (9.5.60)$$

Zamenjivanjem (8.5.60) u (8.5.59) dobija se:

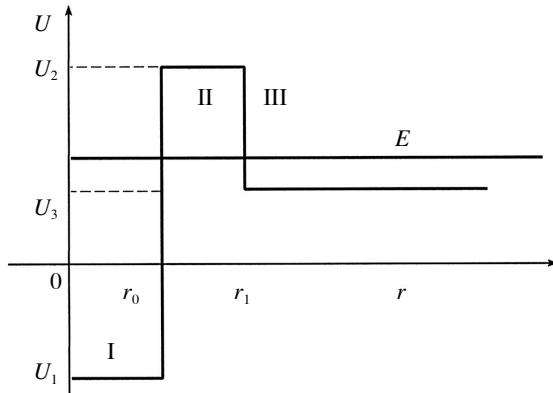
$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(r\psi) + [E - U(r)]\psi = 0. \quad (8.5.61)$$

Uvođenjem smene:

$$r\psi(r) = u(r) \quad (8.5.62)$$

jednačina (8.5.61) konačno dobija oblik:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + [E - U(r)]u = 0. \quad (8.5.63)$$



Slika 8.5.6 Prolazak čestice kroz potencijalnu barijeru – sferno simetrični slučaj.

Kako je koordinata r definisana od nule do beskonačnosti ($0 \leq r \leq \infty$), a zbog zahteva da funkcija ψ bude konačna za sve vrednosti r , funkcija u mora da ima vrednost 0 za $r = 0$ (jer je $\psi = u/r$). Jednačina (8.5.63) je po obliku identična jednodimenzionoj Šredingerovoj jednačini.

Izračunaćemo sada struju gustine verovatnoće $S(r)$, (8.4.35):

$$S(r) = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial (\Psi)^*}{\partial x} \right)$$

$$S(r) = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\frac{u^*}{r} \frac{d}{dr} \left(u \frac{1}{r} \right) - \frac{u}{r} \frac{d}{dr} \left(u^* \frac{1}{r} \right) \right]$$

ili:

$$S(r) = -\frac{i\hbar}{2mr^2} \left(u^* \frac{du}{dr} - u \frac{du^*}{dr} \right). \quad (8.5.64)$$

Ukupna struja gustine verovatnoće kroz sferu poluprečnika r je:

$$S_u(r) = 4\pi r^2 S(r) = -\frac{2\pi i\hbar}{m} \left(u^* \frac{du}{dr} - u \frac{du^*}{dr} \right). \quad (8.5.65)$$

Odredimo sada integral gustine verovatnoće P unutar zapremine sfere poluprečnika r_0 :

$$P = \int_0^{r_0} (\Psi \Psi^*) 4\pi r^2 dr = 4\pi \int_0^{r_0} (uu^*) dr \quad (8.5.66)$$

dok bi prema jednačini (8.4.39), promena ove verovatnoće u vremenu, u granicama od $r = 0$ do $r = r_0$, iznosila:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = 4\pi \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{r_0} (u^* u) dr = \frac{2\pi i\hbar}{m} \left(u^* \frac{du}{dr} - u \frac{du^*}{dr} \right) \Big|_0^{r_0} = S_u(0) - S_u(r_0) = -S_u(r_0) \quad (8.5.67)$$

Istaknimo da u ovom slučaju $S_u(0)$ mora da bude nula jer bi inače postojao „izvor” čestica u tački $r = 0$. Kada je $S_u(r_0)$ ipak različito od nule, tada mora da bude različita od nule promena integrala gustine verovatnoće u vremenu, a između $r = 0$ i $r = r_0$. Ove zaključke iskoristićemo da izračunamo verovatnoću da čestica pređe iz sredine I u sredinu III, vršeći u oblasti II tunel efekt, Slika 8.5.6. U oblasti I i III potencijalna energija čestice niža je od ukupne energije, dok je u oblasti II potencijalna energija čestice veća od njene ukupne energije. U skladu sa prethodnim razmatranjem, zanima nas verovatnoća da čestica napusti sferu poluprečnika r_0 (npr. slučaj emisije α čestice iz jezgra). Napisaćemo Šredingerove jednačine za ovaj slučaj:

$$I: \frac{d^2 u_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_1) u_1 = 0; \quad 0 \leq r \leq r_0 \quad (8.5.68)$$

$$II: \frac{d^2 u_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_2) u_2 = 0; \quad r_0 \leq r \leq r_1 \quad (8.5.69)$$

$$III: \frac{d^2 u_3}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_3)u_3 = 0; \quad r \geq r_1. \quad (8.5.70)$$

Rešenja ovih jednačina su:

$$I: u_1(r) = r\psi_1(r) = A_1 e^{ik_1 r} + B_1 e^{-ik_1 r}; \quad k_1 = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2m(E - U_1)} \quad (8.5.71)$$

$$III: u_3(r) = r\psi_3(r) = A_3 e^{ik_3 r}; \quad k_3 = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2m(E - U_3)}. \quad (8.5.72)$$

Rešenje Šredingerove jednačine u oblasti II nam za sada nije potrebno, mada nam je poznato odranije (videti poglavlje 8.5.4) da rešenje mora biti ekponencijalno opadajuća funkcija. Treba, takođe imati na umu da U_1 ima negativnu vrednost. Smatraćemo da je verovatnoća prolaska čestice iz oblasti I u III izuzetno mala, što znači da upadni i reflektovani talas imaju iste koeficijente (A_1), pa jednačina (8.5.71) dobija oblik:

$$(8.5.71a) \quad I: u_1(r) = r\psi_1(r) = 2iA_1 \sin k_1 r; \quad k_1 = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2m(E - U_1)}.$$

Izračunaćemo sada ukupnu verovatnoću nalaženja čestice unutar sfere poluprečnika r_0 , pomoću jednačine (8.5.66) i (8.5.71a), uzimajući u obzir da zbog konačnosti funkcije $\psi(r)$ mora da bude ispunjeno i $u(0) = 0$ zbog čega se funkcija $U_1(r)$ svodi na sinusni deo:

$$P = 4\pi \int_0^{r_0} (u_1^* u_1) dr \approx 4\pi [2|A_1|^2 r_0]. \quad (8.5.73)$$

Pomoću izraza za ukupan fluks kroz sferu određenog poluprečnika, jednačina (8.5.65) i izraza za propušteni talas u_3 , jednačina (8.5.72), može da se izračuna struja gustine verovatnoće izvan barijere, u oblasti III:

$$S_{III} = -\frac{2\pi i \hbar}{m} \left(u_3^* \frac{du_3}{dr} - u_3 \frac{du_3^*}{dr} \right) = \frac{4\pi \hbar}{m} k_3 A_3^2 = 4\pi v_3 A_3^2 \quad (8.5.74)$$

gde je $v_3 (= \hbar k_3 / m)$ brzina čestice u oblasti III. Uzimajući u obzir uslov održanja, jednačine (8.4.34) i (8.5.67), sledi:

$$\frac{dP}{dt} = -S_3$$

ili:

$$2r_0 \frac{d}{dt} |A_1|^2 = -v_3 A_3^2. \quad (8.5.75)$$

Deljenjem obe strane jednačine (8.5.75) sa A_1^2 i prebacivanjem dt na desnu stranu dobija se:

$$\frac{d|A_1|^2}{|A_1|^2} = -\frac{v_3}{2r_0} \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} dt.$$

Kako je verovatnoća nalaženja čestice unutar sfere poluprečnika r_0 upravo srazmerna sa A_1^2 , to leva strana prethodne jednačine pokazuje kako se ova verovatnoća (P) menja se vremenom:

$$\frac{dP}{P} = -\frac{v_3}{2r_0} \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} dt = -\zeta dt \quad (8.5.76)$$

ili:

$$P(t) = P(0)e^{-\zeta t}$$

pri čemu je konstanta ζ :

$$\zeta = \frac{v_3}{2r_0} \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}. \quad (8.5.77)$$

Potražimo sada vezu između koeficijenta ζ i koeficijenta propustljivosti barijere T . Kako je potencijalna energija čestice s leve i s desne strane barijere različita, U_1 i U_3 , prema (8.5.24) koeficijent propustljivosti T zavisi od odnosa amplituda odgovarajućih talasa ali i od odnosa brzina čestica:

$$T = \frac{v_3}{v_1} \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \quad (8.5.78)$$

pa iz (8.5.77) i (8.5.78) može da se nađe veza između koeficijenta ζ i koeficijenta propustljivosti T :

$$\zeta = \frac{v_1}{2r_0} T. \quad (8.5.79)$$

Količnik $v_1/2r_0$ pokazuje i koliko puta u jednoj sekundi čestica udari o „zid” potencijalne barijere pokušavajući da prođe napolje. Koeficijent propustljivosti T je čisto kvantnomehanički pojam koji govori o mogućnosti tunel efekta. Na jednačinu (8.5.79) vrat ćemo se kada u poglavlju o radioaktivnosti bude govora o α raspadu.

Primeri

Primer 8.5.1 Koliki je koeficijent propustljivosti barijere širine a ako je visina barijere $U = E_0$ a energija čestice pre nailaska na barijeru je $E_0/2$. Širina barijere je: a) $a = 2\lambda$, b) $\lambda = 2a$ gde je λ De Brogljeva talasna dužina pridružena čestici energije $E_0/2$.

REŠENJE:

Upotrebićemo jednačinu (8.5.57):

$$a) T = \frac{4}{sh^2(k_2a) + 4}; k_2a = \frac{2\pi}{h} \sqrt{\frac{2mE_0}{2}} \cdot \frac{h}{\sqrt{\frac{2mE_0}{2}}} \cdot 2 = 4\pi;$$

$$T = \frac{4}{\left(\frac{e^{4\pi} - e^{-4\pi}}{2}\right)^2 + 4} = 1,94 \cdot 10^{-10}$$

$$b) k_2a = \pi; T = \frac{4}{\left(\frac{e^{\pi} - e^{-\pi}}{2}\right)^2 + 4} = 0,0291.$$

Primer 8.5.2 Uporediti koeficijente propustljivosti deuterijuma i vodonika, energije 5 eV, koji prolaze kroz potencijalnu barijeru visine 10 eV i širine 0,01 nm.

REŠENJE:

Deuterijum ima (oko) dva puta veću masu od protona i zbog toga ima manji koeficijent propustljivosti relacije (8.5.58):

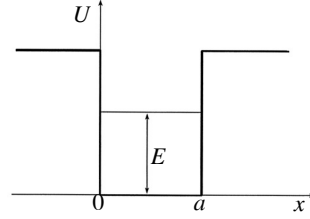
$$\frac{T_1}{T_2} = e^{-\frac{4\pi}{h} \sqrt{2m_D(U-E)}a \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)} = e^{-\frac{4 \cdot 3,142}{6,626 \cdot 10^{-34} Js} \sqrt{4 \cdot 1,673 \cdot 10^{-27} kg \cdot 5 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} J} \cdot 0,01 \cdot 10^{-9} m \cdot 0,29} = 0,018.$$

8.6 POTENCIJALNE JAME

8.6.1 Čestica u jednodimenzionoj jami sa beskonačno visokim zidovima

Potencijalna jama je oblast u kojoj je potencijalna energija čestice ili nula ili je predstavljamo negativnim vrednostima. Izvan jame potencijalna energija čestice je beskonačno velika. Promena potencijalne energije čestice događa se pod dejstvom neke sile u okolini tačaka $x=0$ i $x=a$ (mada je promena potencijala na slici prikazana vertikalnom linijom) i ove tačke predstavljaju položaj „zidova” jame. Dakle, unutar jame, $0 \leq x \leq a$, oblast II, potencijalna energija čestice U jednaka je 0. Izvan jame, $-\infty < x \leq 0$, i $a \leq x < +\infty$, oblasti I i III, potencijalna energija je beskonačno velika, Slika 8.6.1.

Napisaćemo sada Šredingerove jednačine za oblast I, II i III:



Slika 8.6.1 Potencijalna jama sa beskonačno visokim zidovima.

$$I: \frac{d^2 \psi_1}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \psi_1 = 0 \quad -\infty < x \leq 0 \quad (8.6.1)$$

$$II: \frac{d^2 \psi_2}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E \psi_2 = 0 \quad 0 \leq x \leq a \quad (8.6.2)$$

$$III: \frac{d^2 \psi_3}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \psi_3 = 0 \quad a \leq x < +\infty \quad (8.6.3)$$

Po istom postupku kao ranije, nalazimo rešenja Šredingerovih jednačina za oblast I, II i III. Ona glase:

$$I: \psi_1(x) = A_1 e^{k_1 x} + B_1 e^{-k_1 x}; \quad -\infty < x \leq 0 \quad k_1 = \frac{\sqrt{8\pi^2 m(U - E)}}{h} \quad (8.6.4)$$

$$II: \psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}; \quad 0 \leq x \leq a \quad k_2 = \frac{\sqrt{8\pi^2 mE}}{h} \quad (8.6.5)$$

$$III: \psi_3(x) = A_3 e^{k_1 x} + B_3 e^{-k_1 x}; \quad a \leq x < +\infty \quad (8.6.6)$$

Rešenja u oblasti I i III su eksponencijalne funkcije, dok je u oblasti II funkcija kompleksna (ima oscilatorni karakter). Pokazaćemo sada da je vrednost talasne funkcije izvan potencijalne jame jednaka nuli. Konstante $A_1 \dots B_3$, koje se javljaju u izrazima za talasne funkcije, odredićemo iz uslova da funkcija ψ mora da bude konačna i neprekidna za sve vrednosti x -koordinate. Da bi funkcija u oblasti I bila uvek konačna, mora da bude $B_1=0$ (inače bi za $x \rightarrow -\infty$, $\psi \rightarrow \infty$). Zbog toga treba da bude $A_3=0$ (inače $\psi \rightarrow \infty$ za $x \rightarrow \infty$). Dakle, levo od potencijalne jame, izraz za talasnu funkciju svodi se na:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{k_1 x} \quad x \leq 0 \quad (8.6.7)$$

a desno od jame:

$$\psi_3(x) = B_3 e^{-k_1 x} \quad x \geq a \quad (8.6.8)$$

Kako je u ovim oblastima potencijalna energija beskonačno visoka, tada i $k_1 \rightarrow \infty$, pa su oba izraza (8.6.7) i (8.6.8) jednaka nuli. Prema tome, izvan jame vrednost talasne funkcije ψ jednaka je nuli, što znači da u oblastima I i III ne može da se nađe čestica.

Analizirajmo sada talasnu funkciju $\psi_2(x)$ koja je rešenje Šredingerove jednačine za oblast II. Rešenje (8.6.5) može da se napiše u trigonometrijskom obliku. Koristeći Ojlerov obrazac:

$$e^{\pm ik_2 x} = \cos(k_2 x) \pm i \sin(k_2 x) \quad (8.6.9)$$

jednačina (8.6.5) dobija sada oblik:

$$\psi_2(x) = C_2 \sin(k_2 x) + D_2 \cos(k_2 x) \quad (8.6.10)$$

pri čemu je:

$$C_2 = i(A_2 - B_2) \text{ i } D_2 = A_2 + B_2.$$

Konstante C_2 i D_2 koje određuju oblik talasne funkcije unutar jame, odredićemo iz uslova neprekidnosti talasne funkcije na mestima promene potencijala, $x=0$ i $x=a$ i iz zahteva da čestica mora da bude negde unutar jame (uslov normiranja). Pošto je izvan jame $\psi(x)=0$, sledi da talasna funkcija (8.6.10) mora da zadovoljava granične uslove $\psi_2(0)=0$ i $\psi_2(a)=0$, odnosno uslov neprekidnosti. Prvi od njih daje:

$$\psi_2(0) = D_2 = 0$$

što znači da se talasna funkcija (u jami) svodi na oblik:

$$\psi_2(x) = C_2 \sin(k_2 x). \quad (8.6.11)$$

Drugi uslov neprekidnosti glasi:

$$\psi_2(a) = C_2 \sin(k_2 a) = 0$$

što je zadovoljeno za:

$$k_2 a = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (8.6.12)$$

Zamenjivanjem izraza za k_2 (jednačina 8.6.5) u (8.6.12), dobija se:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}. \quad (8.6.13)$$

Energiju čestice E , jednačina (8.6.5), napisali smo sada sa indeksom n , označivši sa E_n energiju koju čestica ima u stanju opisanom brojem n , dakle u kvantnom stanju n . Jednačina (8.6.13) pokazuje da čestica ne može da ima bilo koje (kontinualne) vrednosti, već samo određene, diskretne vrednosti energije. Konstantu C_2 određujemo iz uslova normiranja:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_2(x) \psi_2^*(x) dx = \int_0^a |\psi_2(x)|^2 dx = |C_2|^2 \int_0^a \sin^2(k_2 x) dx = 1. \quad (8.6.14)$$

Ovaj integral lako se izračunava:

$$|C_2|^2 \int_0^a \sin^2(k_2 x) dx = |C_2|^2 \int_0^a \frac{1 - \cos(2k_2 x)}{2} dx = |C_2|^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{1}{4} \sin(2k_2 x) \right]_0^a = |C_2|^2 \frac{a}{2}.$$

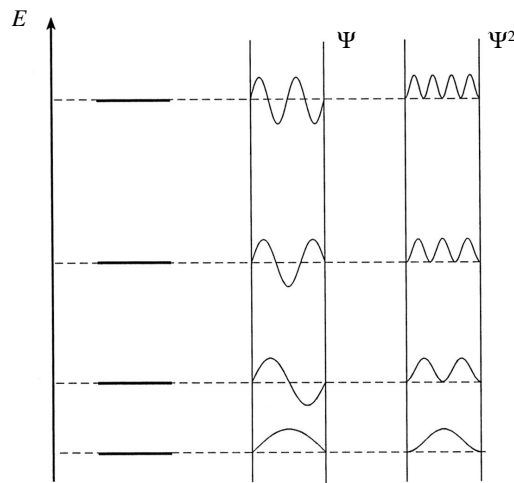
Izjednačavanjem ovog rezultata sa 1 dobija se:

$$C_2 = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (8.6.15)$$

Konačan oblik talasne funkcije, prema tome je:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad (8.6.16)$$

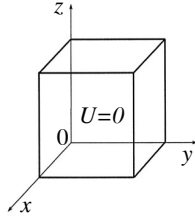
Na Slici 8.6.2 su prikazani energijski nivoi E_n i njima odgovarajuće talasne funkcije $\Psi_n(x)$, kao i kvadrati ovih talasnih funkcija $\Psi_n^2(x)$ koji određuju gustinu verovatnoće nalaženja čestice. Kao što se sa slike vidi, u kvantnom nivou $n=1$, sa najvećom verovatnoćom česticu možemo da nađemo u sredini jame, dok je verovatnoća nalaženja čestice na zidovima jednaka nuli. Ovaj rezultat razlikuje se od onog koji bi dala klasična fizika. „Klasičnu” česticu možemo, sa podjednakom verovatnoćom, da nađemo bilo gde u jami. Slika dalje pokazuje da sa porastom energije (i kvantnog broja n) maksimumi krivih leže sve bliže jedan drugom, tako da bi se pri vrlo velikom broju n dobio rezultat kao za „klasičnu” česticu. I ovo može da se smatra dokazom ispunjenosti principa korespondencije.



Slika 8.6.2 Energijски nivoi, talasne funkcije i funkcije gustine verovatnoće nalaženja čestice u potencijalnoj jami sa beskonačno visokim zidovima.

8.6.2 Čestica u trodimenzionoj jami sa beskonačno visokim zidovima

Neka se čestica nalazi u trodimenzionoj jami, Slika 8.6.3. Ponovo ćemo energiju da računamo u odnosu na dno potencijalne jame. Tada je potencijalna energija: $U=0$ za $0 \leq x \leq a$; $0 \leq y \leq b$; $0 \leq z \leq c$; a $U = \infty$ u svim ostalim slučajevima. Izvan potencijalne jame, talasna funkcija Ψ jednaka je nuli (videti 8.6.1). Unutar jame Šredingerova jednačina ima oblik:



Slika 8.6.3 Čestica u trodimenzionalnoj jami sa beskonačno visokim zidovima.

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E \Psi = 0. \quad (8.6.17)$$

Rešenje jednačine potražićemo uobičajenim metodom razdvajanja promenljivih. Dakle, pretpostavićemo da funkcija Ψ koja je rešenje naše jednačine (i koje zavisi od tri promenljive) može da se napiše kao proizvod tri funkcije od kojih svaka zavisi samo od jedne promenljive:

$$\Psi(x, y, z) = X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z). \quad (8.6.18)$$

Na ovaj način pokušavamo da parcijalnu diferencijalnu jednačinu (8.6.17) rastavimo na tri obične diferencijalne jednačine. Potražimo najpre izvode funkcije (8.6.18):

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = YZ \frac{d^2 X}{dx^2}; \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = XZ \frac{d^2 Y}{dy^2}; \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = XY \frac{d^2 Z}{dz^2}. \quad (8.6.19)$$

Uvrštavanjem funkcije Ψ , jednačina (8.6.18), i njenih izvoda, jednačina (8.6.19), u jednačinu (8.6.17) dobija se:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} Y(y) Z(z) + \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} X(x) Z(z) + \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} X(x) Y(y) + \\ + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E \cdot X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z) = 0. \end{aligned} \quad (8.6.20)$$

Jednačinu (8.6.20) podelićemo sa $X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z)$. Dobićemo:

$$\frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{1}{Y(y)} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + \frac{1}{Z(z)} \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2} E. \quad (8.6.21)$$

Prvi član u jednačini (8.6.21) zavisi samo od x , drugi od y , a treći od z , dok je njihov zbir jednak konstanti. Ovo je moguće samo u slučaju kada je i svaki od ta tri sabirka stalan. Ukupnu energiju E napisaćemo sada kao zbir tri konstante E_1 , E_2 i E_3 :

$$E = E_1 + E_2 + E_3. \quad (8.6.22)$$

Uz ovu smenu jednačina (8.6.21) rastavlja se na tri jednačine:

$$\frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2} E_1; \quad \frac{1}{Y(y)} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2} E_2; \quad \frac{1}{Z(z)} \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2} E_3$$

odnosno:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m E_1}{h^2} X(x) &= 0 \\ \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + \frac{8\pi^2 m E_2}{h^2} Y(y) &= 0 \\ \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} + \frac{8\pi^2 m E_3}{h^2} Z(z) &= 0. \end{aligned} \quad (8.6.23)$$

Svaka od ovih jednačina identična je Šredingerovoj jednačini za česticu u jednodimenzionoj jami sa beskonačno visokim zidovima. Funkcije X , Y i Z zadovoljavaju sledeće granične uslove: $X(a)=X(0)=0$; $Y(b)=Y(0)=0$; $Z(c)=Z(0)=0$ (uslove neprekidnosti) i uslove normiranja:

$$\int_0^a |X(x)|^2 dx = 1; \quad \int_0^b |Y(y)|^2 dy = 1; \quad \int_0^c |Z(z)|^2 dz = 1$$

pa su rešenja jednačina (8.6.23):

$$\begin{aligned} X(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_1 \pi}{a} x\right) \\ Y(y) &= \sqrt{\frac{2}{b}} \sin\left(\frac{n_2 \pi}{b} y\right) \\ Z(z) &= \sqrt{\frac{2}{c}} \sin\left(\frac{n_3 \pi}{c} z\right). \end{aligned} \quad (8.6.24)$$

Za enegije E_1 , E_2 i E_3 dobija se:

$$E_1 = \frac{n_1^2 h^2}{8ma^2}; \quad E_2 = \frac{n_2^2 h^2}{8mb^2}; \quad E_3 = \frac{n_3^2 h^2}{8mc^2}. \quad (8.6.25)$$

Prema tome, talasna funkcija za česticu u trodimenzionoj jami sa beskonačno visokim zidovima ima oblik:

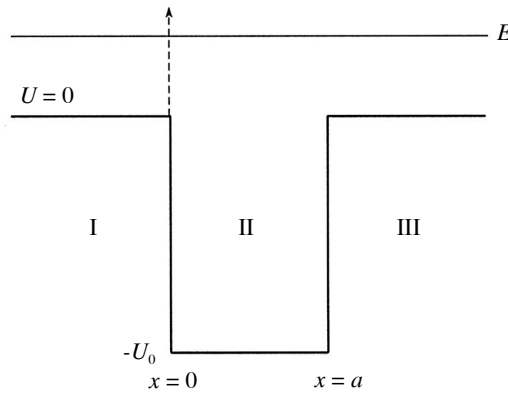
$$\Psi_{n_1 n_2 n_3} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \sin \frac{n_2 \pi y}{b} \sin \frac{n_3 \pi z}{c}. \quad (8.6.26)$$

Diskretne vrednosti energije koje čestica može da ima su:

$$E = E_1 + E_2 + E_3 = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right) \quad (8.6.27)$$

$$n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$$

8.6.3 Prolaz čestice kroz pravougaonu potencijalnu jamu; Ramzauerov efekt



Slika 8.6.4 Prolazak čestice kroz pravougaonu potencijalnu jamu.

Posmatraćemo sada kretanje mlaza čestica sa ukupnom energijom E (u odnosu na nultu vrednost potencijalne energije U) koji prolazi kroz oblasti I, II i III, kao na Slici 8.6.4. U oblasti I i III potencijalna energija čestice U jednaka je nuli, dok se u oblasti II potencijalna energija čestice skokovito menja od 0 na $-U_0$. Kažemo da čestica nailazi na potencijalnu, pravougaonu jamu dubine U_0 i širine a . Pretpostavićemo da mlaz čestica delimično prolazi kroz jamu, a delimično se reflektuje na ivicama jame. Da bismo odredili koeficijente transparentije, napišaćemo, kao i u prethodnim slučajevima, Šredingerove jednačine za ob-

lasti I, II i III:

$$I: \frac{d^2 \psi_1}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E \psi_1 = 0 \quad -\infty < x \leq 0 \quad (8.6.28)$$

$$II: \frac{d^2 \psi_2}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E + U_0) \psi_2 = 0 \quad 0 \leq x \leq a \quad (8.6.29)$$

$$III: \frac{d^2 \psi_3}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E \psi_3 = 0 \quad a \leq x < +\infty \quad (8.6.30)$$

i na isti način kao ranije, naći ćemo rešenje Šredingerovih jednačina za oblasti I, II i III. Ona glase:

$$I: \psi_1(x) = A_0 e^{ik_1 x} + A e^{-ik_1 x} \quad -\infty < x \leq 0, \quad k_1 = \frac{\sqrt{8\pi^2 m E}}{h} \quad (8.6.31)$$

$$II: \psi_2(x) = B e^{ik_2 x} + C e^{-ik_2 x} \quad 0 \leq x < a, \quad k_2 = \frac{\sqrt{8\pi^2 m (E + U_0)}}{h} \quad (8.6.32)$$

$$III: \psi_3(x) = D e^{ik_1 x}, a \leq x < +\infty \quad (8.6.33)$$

i sve imaju oscilatorni karakter. Postavićemo uslove neprekidnosti funkcija i njihovih izvoda na granicama intervala:

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= \psi_2(0) & \psi_2(a) &= \psi_3(a) \\ \psi_1'(0) &= \psi_2'(0) & \psi_2'(a) &= \psi_3'(a) \end{aligned}$$

pa se primenom uslova neprekidnosti na funkcije određene izrazima (8.6.31), (8.6.32) i (8.6.33), dobija:

$$\begin{aligned} A_0 + A &= B + C \\ ik_1 A_0 - ik_1 A &= ik_2 B - ik_2 C \\ B e^{ik_2 a} + C e^{-ik_2 a} &= D e^{ik_1 a} \\ ik_2 B e^{ik_2 a} - ik_2 C e^{-ik_2 a} &= ik_1 D e^{ik_1 a}. \end{aligned} \quad (8.6.34)$$

Nameravamo sada da pomoću jednačina (8.6.34) odredimo koeficijent propustljivosti T potencijalne jame, odnosno udeo čestica koji iz oblasti I prelazi u oblast III. Kao i u prethodnim sličnim slučajevima, koeficijent propustljivosti jednak je $|D/A_0|^2$. Iz jednačine (8.6.34) lako se dobija:

$$\begin{aligned} T = \left| \frac{D}{A_0} \right|^2 &= \left(\frac{D}{A_0} \right) \cdot \left(\frac{D}{A_0} \right)^* = \frac{4k_1 k_2}{[(k_1 + k_2)^2 e^{ik_2 a} - (k_2 - k_1)^2 e^{-ik_2 a}] e^{ik_1 a}} \cdot \\ &\quad \frac{4k_1 k_2}{[(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 a} - (k_2 - k_1)^2 e^{ik_2 a}] e^{-ik_1 a}}. \end{aligned} \quad (8.6.35)$$

Posmatraćemo neke granične slučajeve:

1) $k_1 \ll k_2$ ili $E \ll U_0$. Tada dobijamo:

$$\begin{aligned} T &= \frac{(4k_1 k_2)^2}{(k_2^2 e^{-ik_2 a} - k_2^2 e^{ik_2 a}) e^{-ik_1 a} \cdot (k_2^2 e^{ik_2 a} - k_2^2 e^{-ik_2 a}) e^{ik_1 a}} = \\ &= \frac{(4k_1 k_2)^2}{[-(2ik_2^2 \sin k_2 a)] \cdot [(2ik_2^2 \sin k_2 a)]} = \frac{4k_1^2}{k_2^2 \sin^2 k_2 a} \sim E \end{aligned} \quad (8.6.36)$$

dakle, propustljivost barijere raste linearno sa energijom čestice. Ako su istovremeno ispunjeni uslovi da $E \rightarrow 0$ i $k_2 a = n\pi$ (ovaj slučaj opisaćemo kasnije) dobija se da koeficijent transparenције teži jedinici.

2) U slučaju kada je $E \gg U_0$ ili $k_2 \approx k_1$ dobijamo:

$$T = \frac{4k_1^2}{(4k_1^2 e^{-ik_2 a}) e^{-ik_1 a}} \cdot \frac{4k_1^2}{(4k_1^2 e^{ik_2 a}) e^{ik_1 a}} = 1 \quad (8.6.37)$$

što znači da čestice ne „oseća” prisustvo potencijalne jame i nesmetano prolazi kroz nju.

3) Kada je $k_2 a = n\pi$ (rezonantni slučaj), sledi:

$$2a = n\lambda_2 \quad (8.6.38)$$

gde je λ_2 talasna dužina De Broglievog talasa koji je pridružen čestici. I zaista, kako je kinetička energija čestice u jami T , jednaka $E + U_0$ sledi:

$$k_2 = \frac{\sqrt{8\pi^2 m(E + U_0)}}{h} = \frac{\sqrt{8\pi^2 mT}}{h} = \frac{2\pi}{\lambda_2}. \quad (8.6.39)$$

Jednačina (8.3.39) dobija se kada se uzme u obzir veza između impulsa čestice p_2 u jami i talasne dužine pridružene čestici λ_2 , koja je data De Broglievom jednačinom. Za $k_2 a = n\pi$ je:

$$e^{ik_2 a} = e^{-ik_2 a} = +1$$

za n parno i:

$$e^{ik_2 a} = e^{-ik_2 a} = -1$$

za n neparno. Dalje, na osnovu relacije (8.6.35) se dobija:

$$T = \frac{4k_1 k_2}{[(k_1 + k_2)^2 + (k_1 - k_2)^2] e^{ik_1 a}} \times \frac{4k_1 k_2}{[(k_1 + k_2)^2 + (k_1 - k_2)^2] e^{-ik_1 a}} = 1. \quad (8.6.40)$$

Poslednjom jednačinom pokazano je da je jama potpuno prozračna za čestice s energijama koje ispunjavaju uslov $k_2 a = n\pi$. Istovremeno, ovaj uslov znači da je širina jame a jednaka celobrojnom umnošku polovina talasnih dužina De Broglievog talasa koji je pridružen čestici u jami, jednačina (8.6.38). Ovakva pojava može se uporediti sa selektivnim propuštanjem svetlosti kroz uzane slojeve stakla i dielektrika (filtri). Pažljivim izborom debljine filtra postiže se koeficijent propustljivosti $T \sim 1$ u uskom opsegu talasne dužine λ i $\lambda + \Delta\lambda$.

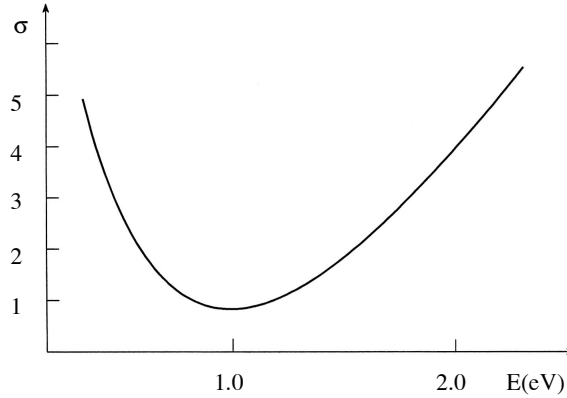
Slučaj koji je opisan jednačinom (8.6.38) sreće se u eksperimentima pod nazivom Ramzauerov efekt ili tačnije Ramzauer-Taunsendov efekt, nazvan po istraživačima koji su ga, nezavisno jedan od drugog, otkrili. U ovim eksperimentima ispitivano je rasejavanje elektrona na određenim atomima i zapaženo je da **efikasni presek** (videti poglavlje 10.1) za zahvatanje elektrona metom određene vrste ima najmanju vrednost pri određenoj energiji elektrona, Slika 8.6.5. To, praktično, znači da elektroni sa takvom energijom u potpunosti prolaze kroz metu. U skladu sa teorijskim proračunom koji smo razmatrali, u ovom slučaju atom poluprečnika R smatraćemo pravougaonom potencijalnom jamom, što znači da je $a = 2R$, pa naš uslov, prema (8.6.38), glasi:

$\lambda_2 = 4R$ ili što odgovara, na osnovu De Broglijeve jednačine, kinetičkoj energiji elektrona unutar jame:

$$\lambda_2 = \frac{h}{p_2};$$

$$T = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{h^2}{32mR^2}$$

pa se za $R = 1 \text{ \AA}$ dobija za kinetičku energiju elektrona **unutar jame** vrednost od 10 eV. Prema Slici 8.6.5 minimum krive, koja pokazuje zavisnost efikasnog preseka za zahvatanje elektrona od energije upadnih elektrona, leži na oko 1 eV, ukazujući na to da dubina potencijalne jame iznosi oko 10 eV (tačnije 9 eV jer je $U_0 = E - T = 1 - 10 = -9 \text{ eV}$).



Slika 8.6.5 Ramzauerov efekt. Minimum efikasnog preseka kod rasejavanja elektrona ksenonom javlja se pri početnoj energiji elektrona od 1 eV.

Kao što smo ranije pomenuli, ovakvo ponašanje elektrona slično je pojavi selektivnog propuštanja svetlosti određene talasne dužine, kroz tanke slojeve stakla ili nekih durgih dielektrika. Pažljivim podešavanjem debljine pločice postiže se da pločica propusti svetlost određene talasne dužine, pri čemu je smanjenje intenziteta daleko manje nego kod običnih obojenih filtera.

Primeri

Primer 8.6.1 Izvesti opšti oblik izraza za koeficijent transparencije T kod prolaska čestice kroz potencijalnu jamu. Nacrtati zavisnost koeficijenta transparencije T od E/U_0 , gde je E početna energija elektrona, a U_0 dubina potencijalne jame. Uzeti da je dubina jame 10 KeV, a širina 1 Å.

REŠENJE:

Na osnovu jednačine (8.6.35) dobija se:

$$T = \frac{(4k_1k_2)^2}{[(k_1 + k_2)^2]^2 + [(k_1 - k_2)^2]^2 - 2(k_1 + k_2)^2(k_1 - k_2)^2(\cos^2 k_2 a - \sin^2 k_2 a)}. \quad (8.6.41)$$

Sređivanjem jednačine (8.6.41), dobija se:

$$T = \frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a}. \quad (8.6.42)$$

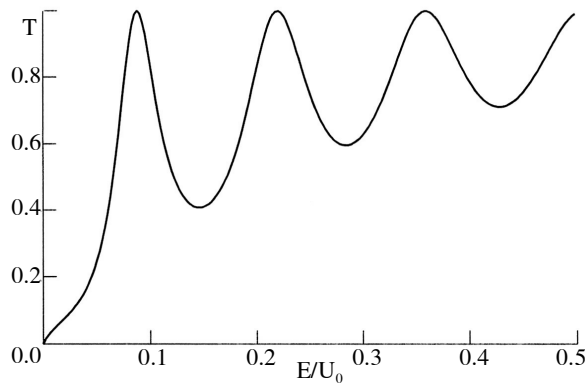
Zamenjivanjem izraza za k_1 i k_2 , jednačine (8.6.31) i (8.6.32) i uvođenjem smena:

$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}a = \beta; \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}; \quad \frac{E}{U_0} = \eta$$

dobija se izraz pogodan za izračunavanje i grafičko predstavljanje:

$$T = \frac{4\eta(1+\eta)}{4\eta(1+\eta) + \sin^2(\beta\sqrt{1+\eta})}. \quad (8.6.43)$$

Pri vrednosti $U_0 = 10 \text{ KeV}$ ($\beta = 16,3\pi$) i za E/U_0 u rasponu od 0,01 do 0,5 dobija se kriva kao na Slici 8.6.6.



Slika 8.6.6 Zavisnost koeficijenta transparencije od energije elektrona. Dubina potencijalne jame iznosi 10 keV ($a\sqrt{2mU_0}/\hbar = \beta = 16,3\pi$). Potpuna, sto-procentna propustljivost dobija se pri određenim vrednostima energije elektrona.

Primer 8.6.2 Napišite talasnu funkciju elektrona koji se ubrzan naponom od a) 10 V, b) 1000 V, kreće u pozitivnom smeru x -ose. Kolike su De Brogljeve talasne dužine elektrona u oba slučaja?

REŠENJE:

$$\text{a) } T = E = (1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot 10 \text{ V}) = 1,602 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$$\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mEx}} = Ae^{i27,68x/nm}; \quad \lambda = \frac{2\pi}{27,68} = 0,227 \text{ nm};$$

$$\text{b) } E = 1,602 \cdot 10^{-16} \text{ J}; \quad \psi = Ae^{i276,8x/nm}; \quad \lambda = \frac{2\pi}{276,8} = 0,0227 \text{ nm}.$$

Primer 8.6.3 Elektron se nalazi u jami sa beskonačno visokim zidovima. Kolika širina jame treba da bude pa da energija elektrona u osnovnom stanju bude jednaka njegovoj energiji mirovanja, $E_1 = m_0c^2$?

REŠENJE:

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{8m_0a^2} = m_0c^2 \Rightarrow a = \frac{\hbar}{\sqrt{8m_0c}} = \frac{1}{\sqrt{8}}\lambda_C = 0,353 \cdot 0,00242 \text{ nm} = 8,578 \cdot 10^{-4} \text{ nm}.$$

λ_C je Komptonova talasna dužina.

Primer 8.6.4 Jezgro atoma možemo shvatiti kao potencijalnu jamu u kojoj su smešteni nukleoni sa diskretnim vrednostima energije. Ako je širina potencijalne jame $2r$ gde je r poluprečnik jezgra, npr. deuterijuma ($2r=3\cdot 10^{-15}\text{m}$), odrediti energiju pobuđivanja ovog jezgra iz osnovnog u prvo pobuđeno. Masa protona je $1,673\cdot 10^{-27}\text{kg}$.

REŠENJE:

$$E_2 - E_1 = \frac{3h^2}{8m(2r)^2} = \frac{3(6,626 \cdot 10^{-34})^2 J^2 s^2}{8 \cdot (3 \cdot 10^{-15})^2 m^2 \cdot 1,673 \cdot 10^{-27} kg} = 1,092 \cdot 10^{11} J = 68,25 MeV.$$

Primer 8.6.5 Kolika je degeneracija energijskog stanja $E_n=14h^2/(8ma^2)$ ako se čestica mase m nalazi u trodimenzionoj jami sa beskonačno visokim zidovima?

REŠENJE:

U skladu sa relacijom (8.6.27), energija čestice je:

$$E_n = \frac{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)h^2}{8ma^2} = \frac{(3^2 + 2^2 + 1^2)h^2}{8ma^2} = \frac{14h^2}{8ma^2}.$$

Degenerisana stanja su stanja iste energije koja se mogu, međutim, realizovati na različite načine. U našem slučaju to znači kombinovanjem kvantnih brojeva n_x , n_y , n_z , pri čemu svaki od ovih brojeva može imati vrednosti 1 ili 2 ili 3. Takvih kombinacija ima šest:

n_x	n_y	n_z
1	2	3
1	3	2
2	1	3
2	3	1
3	1	2
3	2	1

pa je stepen degeneracije stanja $E_n=14h^2/(8ma^2)$ 6.

Princ Luj – Viktor de Brojli (Prince Louis – Victor de Broglie, 1892–1987), rodio se u Dijepu (Francuska). U doktoratu koji je odbranio na Sorboni 1924. godine, postavio je čuvenu relaciju između impulsa čestice i talasne dužine, koju je E. Šredinger iskoristio u formulaciji talasne mehanike. Bio je predavač na Sorboni a kasnije profesor teorijske fizike i direktor Instituta Anri Poenkare. Za otkriće talasne prirode elektrona dobio je Nobelovu nagradu za fiziku 1929. godine.



Ervin Šredinger (Erwin Schrödinger, 1887–1961), rodio se u Beču, gde je i studirao fiziku. Dok je bio profesor u Cirihi bavio se statističkom termodinamikom, opštom teorijom relativnosti i teorijom opažanja boja. Godine 1926. postavio je čuvenu jednačinu i iste godine dokazao ekvivalentnost talasnog i matričnog kvantnomehaničkog formalizma. Bio je profesor Berlinskog univerziteta posle Maksa Planka, 1927–1933, ali je, kao poznati liberal, morao da emigrira iz Nemačke. Iste godine (1933), dodeljena mu je, zajedno sa Dirakom, Nobelova nagrada za fiziku, za istraživanja u oblasti atomske strukture. Godine 1936. vratio se u Grac ali je opet morao da emigrira kada je Austrija pripojena Nemačkoj. Od 1940. do 1955. godine bio je profesor u Institutu za fundamentalna istraživanja u Dablinu. Njegovi radovi odigrali su ključnu ulogu u izgradnji kvantne teorije i predstavljaju osnovu na kojoj se zasniva savremena atomska fizika.

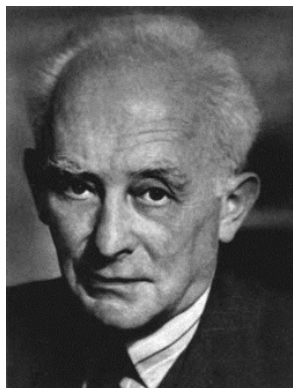


Verner Hajzenberg (Werner Heisenberg, 1901–1976), rodio se u Virzburgu (Nemačka) a doktorirao na Minhenskom univerzitetu kod Arnolda Zomerfelda, koji je bio profesor i mentor. Tri godine je proveo u Kopenhagenu kod Nilsa Bora a u periodu 1927–1941. bio je profesor teorijske fizike u Lajpcigu i Berlinu. Godine 1941. postaje profesor i direktor Instituta za fiziku „Maks Plank” prvo u Berlinu, a zatim u Getingenu i najzad, od 1955, u Minhenu. Godine 1927. formulisao je princip neodređenosti na kome se zasniva „Kopenhagenska interpretacija” kvantne mehanike. Za stvaranje kvantne mehanike u matričnoj formi, 1932. godine dobio je Nobelovu nagradu za fiziku.

Ser Džordž Padžet Tomson (Sir George Paget Thomson, 1892–1975), je, kao i njegov otac Dž. Dž. Tomson, pohadao Trinitu koledž u Kembridžu, gde je u Kevendiškoj laboratoriji neko vreme proveo kao postdiplomac. Radio je u Kembridžu, Univerzitetu u Aberdinu i Imperijalnom koledžu u Londonu. Izučavao je rasejanje elektrona na celuloidu i tako uočio njegovu talasnu prirodu. Za taj rad, zajedno sa Devisonom, podelio je Nobelovu nagradu za fiziku 1937. godine. Neko je primećio da je Dž. Dž. Tomson (otac) dobio Nobelovu nagradu zato što je pokazao da je elektron čestica a Dž. P. Tomson (sin) zato što je pokazao da on to nije.



Klinton Džozef Dejvison (Clinton Joseph Davisson, 1881–1958), rodio se u Blumingtonu (Ilinois, SAD). Od 1917. do 1946. bio je istraživač u Belovim laboratorijama, u periodu 1946–1954, profesor na Virdžinija univerzitetu u Šarlotsvilu. Zajedno sa Džermerom 1927. godine eksperimentalno je dokazao difrakciju elektrona na kristalima, što je predstavljalo odlučujuću potvrdu talasne prirode materije. Nobelovu nagradu za fiziku dobio je sa Dž. P. Tomsonom 1937. godine za eksperimentalni pronalazak difrakcije elektrona na kristalima.



Maks Born (Max Born, 1882–1970) se rodio u Breslau u Nemačkoj (današnjem Wrocławu u Poljskoj). Njegov otac, Gustav Born, bio je poznati anatom i embriolog. Majka Margareta poticala je iz bogate porodice industrijalaca. Born se 1901. godine upisao na studije i to na Univerzitet u Breslauu ali je studirao i na drugim univerzitetima. Tako je 1902. godinu proveo na univerzitetu u Hajdelbergu, a 1903. u Cirihi. Zatim odlazi na čuveni univerzitet u Getingenu, gde pohađa predavanja velikih matematičara Hilberta (David Hilbert), Minkovskog (Herman Minkowski), Klajna (Felix Klein), Rungea (Carl Runge). Kasnije će, posle položenog doktorata, kratko boraviti i u Kembridžu, gde će eksperimentalnu fiziku izučavati kod Larmora i Tomsona. Born zatim počinje istraživanja iz teorije relativnosti (o relativističkom elektronu), posle čega dobija mesto u Getingenu. Dalje se bavi vibracijama atoma u kristalnoj rešetki i o

tome izdaje i knjigu *Dinamika kristalne rešetke*, 1915. godine. Početkom Prvog svetskog rata (1914), postaje profesor na Univerzitetu u Berlinu, gde će mu kolege biti Plank, Nernst, Ajnštajn, koji će mu postati i prijatelj (zajedno će svirati, Ajnštajn violinu a Born klavir). Born napušta Berlin 1919. kada prelazi u Frankfurt na Majni, gde se zadržava samo dve godine, a 1921. prelazi u Getingen kao profesor ali i direktor Instituta za fiziku. U Getingenu provodi sledećih dvanaest godina. Radi zajedno sa Hajzenbergom i Jordanom na formulisanju principa matrične, kvantne mehanike. Po uspostavljanju Šredingerove talasne mehanike povezuje talasnu funkciju sa gustinom verovatnoće i tako postavlja statističku interpretaciju kvantne mehanike. Za istraživanja u kvantnoj mehanici a naročito za njenu interpretaciju dobija, 1954. godine, Nobelovu nagradu za fiziku.

Nakon dolaska nacionalsocijalista na vlast 1933. godine, Max Born napušta Nemačku. Kraće vreme provodi u Kembridžu i Indiji, gde radi sa C. V. Ramanom. Konačno se zadržava u Edinburgu u Škotskoj, kao profesor teorijske fizike. U naučnom radu ponovo se vraća proučavanju dinamike kristalne rešetke.

Godine 1953. vraća se u Nemačku i nastanjuje blizu Getingena u Bad Pirmontu. Umro je 1970. godine. Na nadgrobnom spomeniku na Getingenskom groblju, gde je sahranjen, stoji uklesana relacija $i(pq - qp) = \hbar/2\pi$.

