Uvod u kvantnu fiziku

Dubravko Klabučar

Fizički odsjek
Prirodoslovno-matematički fakultet
Bijenička cesta 32

Sveučilište u Zagrebu

Hrvatska

Sadržaj

Predgovor 9

1 Povijesni pregled kao uvod **13**

1.1 U početku bijahu zagonetke svjetla 13

1.2 O širem kontekstu relevantnih spoznaja do 1913. 19

1.3 Skica prve faze razvoja kvantne fizike 21

1.4 Zadaci **1** 25

2 Zračenje crnog tijela **27**

2.1 Definicija crnog tijela i njegovog zračenja 27

2.2 Dometi klasične teorije. Ultraljubičasta katastrofa 31

2.3 Planckova kvantna hipoteza i njeni rezultati 39

2.4 Inspiracija za Einsteinove čestice svjetla 45

2.5 Zadaci **2** 48

3 Fotoelektrični efekt i hipoteza o kvantima svjetlosti **55**

3.1 Ideja da kvante energije nose kvanti elektromagnetskog polja 55

3.2 Kronologija i značenje fotoelektričnog efekta 56

3.3 Hertzovo otkriće foto-efekta 57

3.4 Daljnji eksperimentalni razvoj 59

3.5 Einsteinovo objašnjenje foto-efekta 63

3.6 Zadaci **3** 71

4 Comptonov efekt – konačan dokaz fotona 75

4.1 Klasična raspršenja elektromagnetskih valova 75

4.2 Comptonovo raspršenje mijenja valnu duljinu 76

4.3 Zadaci **4** 82

5 Prvi uvidi u strukturu atoma i put od stare kvantne prema pravoj kvantnoj teoriji 85

5.1 Rutherfordovo raspršenje otkriva jezgru atoma 86

5.2 Bohrov model - plodan iako pogrešan 92

5.3 Status Bohrovog modela u razvoju kvantne teorije 109

5.4 Bilanca zastoja pred prekretnicom 115

5.5 Zadaci **5** 116

6 De Broglieovi valovi i Schrödingerova jednadžba 119

6.1 Kraj početka: de Broglieva hipoteza o valovima materije . . 119

6.1.1 De Broglieva valna duljina i stabilnost kvantnih sustava 122

6.2 Valne funkcije de Broglievih valova zadovoljavaju Schrödingerovu jednadžbu 124

6.2.1 Schrödingerove jednadžbe s raznim potencijalnim energijama V 129

6.2.2 Poopćenje na tri prostorne dimenzije 130

6.3 O de Broglievoj relativističkoj motivaciji 132

6.4 Zadaci **6** 135

7 Eksperimenti kažu: kvantni valovi su valovi vjerojatnosti, a njihove jednadžbe su linearne 141

7.1 Eksperimenti s kvantnim česticama pokazuju interferenciju valova s de Broglieovim valnim duljinama 141

7.2 Kvantone detektiramo kao pojedinačne čestice, pa je nužna Bornova interpretacija 144

7.3 O normi valnih funkcija kvantnih stanja 148

7.3.1 Računanje prosječnih vrijednosti 150

7.3.2 Modifikacije uvjeta normalizacije za nevezana stanja . 151

7.3.3 Norma funkcije je specijalan slučaj skalarnog produkta funkcijâ 152

7.3.4 Opaske o notaciji* 154

7.4 Zadaci 7 155

8 Najjednostavniji kvantni valovi i njihove jednadžbe 161

8.1 Osnovno valno rješenje – ravni val 161

8.2 Najjednostavnije svojstvene diferencijalne jednadžbe 163

8.3 Operator Hamiltonijana 165

8.4 Schrödingerova jednadžba u tri dimenzije 168

8.5 Vremenski neovisna Schrödingerova jednadžba i stacionarna stanja 169

8.5.1 Specijalni slučaj ravnih valova 169

8.5.2 Slučaj vremenski neovisne, ali inače proizvoljne potencijalne energije V 170

8.6 Najjednostavnije vezano stanje - u beskonačno dubokom pravokutnom potencijalu 175

8.6.1 Svojstvene funkcije Hamiltonijana ove jame 176

8.6.2 Superpozicije svojstvenih funkcija Hamiltonijana 178

8.6.3 Postoje poopćenja na realistične vezane sustave 179

8.7 Uz Schrödingerovu, postoje i druge kvantne valne jednadžbe . 180

8.8 Zadaci 8 183

9 Neki osnovni aspekti valnog formalizma 185

9.1 Prikaz općenitih valova Fourierovim redovima i integralima 186

9.1.1 Fourierovi redovi sinusâ i kosinusâ 187

9.1.2 Fourierova analiza i pravokutna potencijalna jama . . . 189

9.1.3 Fourierov red kompleksnih eksponencijalâ 191

9.1.4 Normiranje kompleksnih eksponencijala na konačnom intervalu 194

9.1.5 Fourierov transformat 195

9.1.6 Integralne reprezentacije Diracove delta-funkcije 196

9.2 Disperzijske relacije za razne kvantone 198

9.3 Putujući i stojni valovi 199

9.4 Fourierovi integrali i valni paketi kvantona 203

9.4.1 Valne funkcije u impulsnom prostoru 204

9.4.2 Heisenbergove relacije neodređenosti iz Fourierove analize 206

9.5 Zadaci 9 208

10 Vremenski razvoj valnih paketa - slobodnih kvantona 213

10.1 Vremenska ovisnost i propagacija vala 213

10.2 Zapis vremenskog razvoja valne funkcije pomoću propagatora 216

10.2.1 Generalizacija kvantnih amplitudâ i pravilâ računanja s njima 218

10.2.2 Analitički izraz za propagator (10.8) za slobodnu Schrödingerovu jednadžbu, te njegove primjene 222

10.3 Utjecaj disperzije na propagiranje valnih paketa 223

10.4 Poopćenje na tri prostorne dimenzije 225

10.5 Posebno jednostavan primjer valnih paketa, grupne brzine i modulacije 230

10.6 Vremenska evolucija i grupna brzina općenitog valnog paketa 232

10.7 Valni paketi kao opis kvantnih objekata 234

10.7.1 Grupna brzina valova vjerojatnosti i veza s brzinom klasične čestice 235

10.8 Zaključak 236

10.9 Zadaci 10 239

Dodaci **243**

A Osnovno o Fourierovim redovima **245**

A.1 Fourierov prikaz funkcijâ fundamentalnog perioda 2π 246

A.2 Od perioda 2π do proizvoljnog perioda $\mathscr{P}$ 249

A.3 Zadaci A 254

B Osnovno o Diracovoj delta funkciji **255**

B.1 Reprezentacija Diracove delta funkcije limesom pravokutnih funkcija $\delta_n(x)$ 259

B.2 Integralna reprezentacija Diracove delta funkcije 261

B.3 Zadaci B 263

C Kazalo **265**

Predgovor

Ove, 2023. godine ulazimo u razdoblje stogodišnjicâ znanstvenih proboja de Brogliea i Schrödingera, kojima je počeo prelazak kvantne mehanike u njen moderni oblik. A prošle, 2022. godine, Nobelova nagrada za fiziku dodijeljena je Aspectu, Clauseru i Zeilingeru za eksperimente sa spregnutim, zapletenim kvantnim stanjima. Oni pojašnjavaju mogućnosti tumačenjâ temeljâ kvantne teorije, te otvaraju put novim tehnologijama. I stogodišnjice de Brogliea i Schrödingera i nedavne Nobelove nagrade ukazuju na važnost izlaganja osnova kvantne fizike na sveučilišnim studijima, te priliku da se zanimanje za nju potakne i u krugovima širim od uobičajenih. Ovo djelo je naravno prije svega posvećeno prvome, no nadam se i drugome.

Ova knjiga potpuno pokriva predviđene sadržaje novog kolegija *Uvod u strukturu materije* na trećoj godini preddiplomskih studija fizike na nastavnim smjerovima, te daje temeljitu pripremu za novi kolegij *Kvantna fizika* na diplomskim studijima novih nastavničkih studijskih programa. Sada se upotrebljava na sadašnjem kolegiju *Kvantna fizika* na sadašnjim integriranim preddiplomskim i diplomskim sveučilišnim studijima fizike, fizike i kemije, fizike i tehnike, matematike i fizike, te fizike i informatike sadašnjih nastavničkih studijskih programa Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu.

Prvo, uvodno poglavlje daje pregled bitnih aspekata povijesnog konteksta fizike krajem 19. i početkom 20. stoljeća. To čitatelju objašnjava okolnosti koje su pojedine znanstvenike dovele do prvih spoznaja o temeljnoj, mikroskopskoj strukturi materije i novim prirodnim zakonima koji tu vladaju – dakle, do pojave kvantne fizike.

Izlaganje se nastavlja s manifestacijama kvantne fizike u elektrodinamici – naime s poglavljima: 2. Zračenje crnog tijela, 3. Fotoelektrični efekt i hipoteza o kvantima svjetlosti, te 4. Comptonov efekt – konačan dokaz fotona. Tu se iznose i raspravljaju empirički razlozi za odstupanje od klasične elektrodinamike – konkretno, za postojanje kvanata energije i kvanata elektromagnetskog polja, te ono što se može kvantima objasniti čak i bez uvođenja novog teorijskog formalizma za njih.

Peto poglavlje počinje Rutherfordovim eksperimentom i diskusijom empi-

ričkih uvidâ koje je pružio o nuklearnoj strukturi atoma. Iznose se pitanja koje je pred fizikalnu teoriju postavilo Rutherfordovo raspršenje i njegov planetarni model atoma, te kako je Bohr pokušao dati odgovor postulirajući *ad hoc* kvantne dopune klasičnoj fizici. Objašnjeni su uspjesi, vrlo značajni ali i vrlo ograničeni, tako dobivene "stare kvantne teorije". Međutim, istaknute su i njene unutrašnje kontradikcije uslijed oslonca na klasične teorijske pojmove, zbog čega ona završava kao slijepa ulica. Peto poglavlje govori i o pojedinim pokušajima da se izvorni Bohrov model atoma usavrši da bi se spasio taj koncept mješavine familijarne klasične fizike s novim kvantnim idejama, jer mnoge zanima zašto nema načina da se zadrži zorni klasični pojam gibanja po određenoj putanji. Naravno, ostali čitatelji, a naravno i standardna nastava, mogu te dijelove preskočiti zbog uštede vremena za ostatak kolegija. Pažnju valja posvetiti prvenstveno argumentima zašto je unutar atoma, molekula i drugih kvantnih sustava, elektronima i drugim mikro-česticama nemoguće gibanje po točno određenim, deterministič kim stazama, te da probabilistički opis omogućuje rješenje. No treba uočiti i one elemente koji su se pokazali od trajne vrijednosti jer postoje kao ključni pojmovi i u pravoj kvantnoj teoriji.

Ove godine, 2023, navršava se stoljeće od prve de Broglieve publikacije, a iduće je stogodišnjica njegove obrane doktorata o "valovima materije". Svoju slavnu valnu jednadžbu za njih je Schrödinger predložio 1925, a objavio 1926, pa će proslava stogodišnjice kvantne teorije vjerojatno biti 2025.

U svakom slučaju, poglavlje stogodišnjice kvantne teorije ovdje je šesto poglavlje, jer objašnjava kako je spas iz slijepe ulice stare kvantne teorije i put prema pravoj teoriji kvantnih fenomena pružila de Broglieva hipoteza o tzv. "valovima materije", ili točnije, o sličnosti masivnih mikro-čestica poput elektrona s kvantima elektromagnetskog polja – fotonima. Pokazuje se da de Broglieva valna duljina elektronâ rješava stari problem stabilnosti atoma, za razliku od klasične teorije, te da dovodi do barem grubog oblika Heisenbergovih relacija neodređenosti. Također se pokazuje da valne funkcije tih masivnih kvantnih čestica zadovoljavaju Schrödingerovu jednadžbu, te se razmatraju jednostavna rješenja.

Potom poglavlja od sedmog do desetog razrađuju uvod u složenije aspekte teorijskog formalizma i osnove njene matematičke formulacije. To se čini samo na najjednostavnijim kvantnim sustavima – slobodnoj kvantnoj čestici za nevezana, te zatočenoj u pravokutnom potencijalu za vezana stanja – ali

vrlo detaljno i na više načina. Međutim, kolegij *Uvod u strukturu materije* dobio je i zadaću na novom studiju da između metoda teorijske fizike izloži osnove Fourierove analize. To je pak omogućilo i da se izlože neke jedinstvene veze u teorijskoj fizici, poput metode propagatora izražene u obliku Huygensovog principa, a dobivene pomoću Fourierove transformacije. No kako se te teorijske metode, izložene pred kraj knjige, obično ne iznosi u uvodnim tekstovima, pojedine takve primjere (poput rješavanja vremenski ovisne Schrödingerove jednadžbe metodom propagatora, ili kako se do nekih relativističkih kvantnih jednadžbi može doći istim postupkom kao do Schrödingerove, ili neka od poopćenja na više dimenzija) nastavnik kolegija *Uvod u strukturu materije* može odlučiti ispustiti. No ako student ta poglavlja savlada u cjelosti, bit će vrlo temeljito pripremljen da sljedeće akademske godine odmah nastavi sa sadržajima predmeta *Kvantna fizika* na diplomskom studiju novih nastavničkih studijskih programa.

Na kraju svakog poglavlja su i odgovarajući zadaci, od kojih su neki detaljno riješeni. Ima i zadataka s odabranim temama osobitog značaja, pa oni sadrže i iscrpna objašnjenja značenja i važnosti tih temâ.

Za čitatelje koji imaju potrebu osnove Fourierovih redova ili Diracove delta funkcije naučiti sistematskije i nezavisno od primjene u kvantnoj teoriji, dodata su još i posebna dva poglavlja o tim temama, iako se elementi neophodni za ovaj kolegij iznose već od sedmog do desetog poglavlja. Shodno ulozi dodijeljenoj kolegiju *Uvod u strukturu materije* u novim nastavničkim studijskim programima, tako su izložene pojedine metode teorijske fizike koje su od koristi i u mnogim drugim područjima, gdje se god javljaju oscilacije i valovi, a ne samo u kvantnoj fizici. Zato često ističemo kada se radi o kvantnom valu vjerojatnosti, a kada se govori o općenitostima koje vrijede za sve valove.

Dubravko Klabučar
U Zagrebu, 2. ožujka 2023.

Poglavlje 1

Povijesni pregled kao uvod

1.1 U početku bijahu zagonetke svjetla

U XIX stoljeću fizika je doživjela golem napredak.

Razvoj elektriciteta i magnetizma koji je doveo do Maxwellove elektromagnetske teorije polja, time omogućeno uključenje optike među elektromagnetske fenomene, dovođenje klasične mehanike gotovo do savršenstva, utemeljenje i razvoj termodinamike i statističke fizike, formuliranje mnogih univerzalnih principa fizike kao što je zakon o sačuvanju energije - sve su to samo neki sjajni primjeri napretka fizike u to vrijeme.

Doduše, oni najveći umovi, i to baš oni koji su davali najvažnije i najveće doprinose razvoju i razumijevanju fizike, nisu se uspavali samozadovoljstvom, a još manje prepustili osjećaju trijumfa. Uočavali su teškoće za koje su uviđali da nisu samo tehničke već bitne prirode.

Jedan takav primjer je razvoj Maxwellove kinetičke teorije plinova kojom je objasnio mnogo toga: Boyleov zakon, viskoznost plinova, teoriju difuzije, itd. Međutim, sâm Maxwell je pritom uvijek isticao kako se njome baš nikako ne mogu objasniti toplinski kapaciteti plinova i upozoravao je da je to fundamentalna teškoća te inače spektakularno uspješne teorije. Dakle, oni

najdublji umovi među znanstvenicima znali su prepoznati bitne strukturne nedostatke, one važne pukotine u zgradi koju su baš oni u mnogome izgradili, a koje su razriješene tek kasnijim uvođenjem kvantne mehanike.

Ipak, među daleko najvećim brojem fizičara i drugih znanstvenika pri kraju devetnaestog stoljeća, bio je vrlo raširen osjećaj da je razvoj fizike kao fundamentalne znanosti pri kraju jer da je – tako su mnogi mislili – sve bitno već otkriveno, da su svi fizikalni zakoni već poznati i da će se pomoću njih razriješiti svi preostali neriješeni problemi. Ironično nas se danas doima to da je osnivača kvantne mehanike Maxa Plancka njegov mentor nastojao odvratiti od nastavka karijere u teorijskoj fizici, jer je po njegovoj ocjeni teorijska fizika već bila zatvorena disciplina u kojoj se više ne može otkriti nešto bitno novo. Dobro je što Max Planck nije poslušao* taj savjet jer se ubrzo pokazao vrlo pogrešnim. Naime, do početka XX stoljeća nagomilalo se mnogo eksperimentalnih otkrića od fundamentalne važnosti koja se nikako nisu mogla uklopiti u okvir do tada poznate fizike, pa je postalo jasno da je ta fizika - koju danas zovemo klasičnom - zapravo vrlo nekompletna. Ta kriza klasične fizike je bila razriješena s jedne strane formuliranjem teorije relativnosti, a s druge otkrićem kvantne mehanike. Ovdje je upravo ovo drugo predmet našeg interesa.

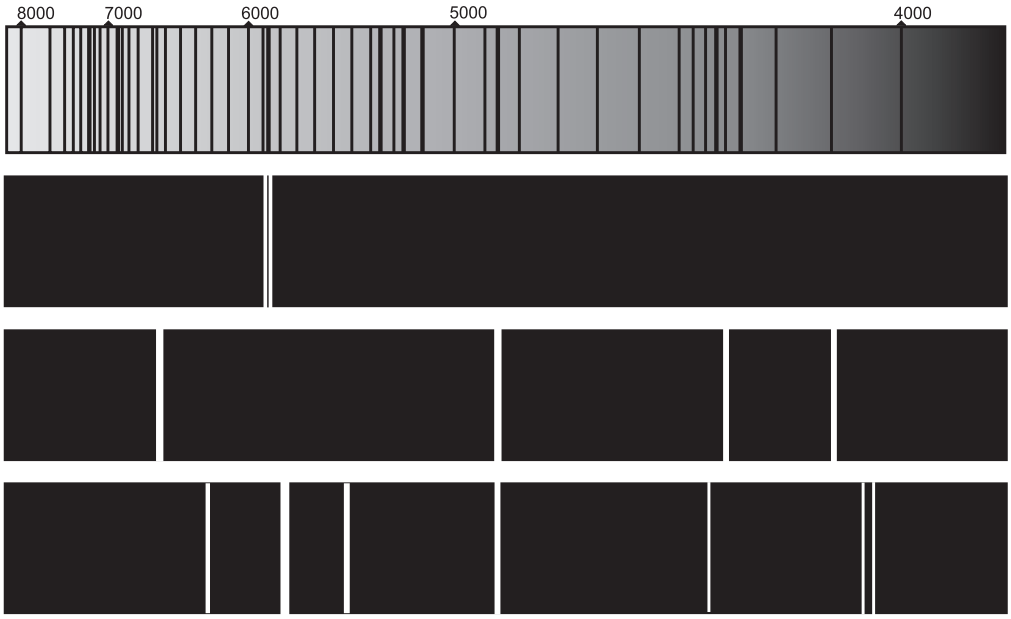
Temelji kvantne mehanike bili su položeni eksperimentima izvedenim krajem devetnaestog i početkom dvadesetog stoljeća u raznim granama fizike, kao npr. atomska spektroskopija, proučavanje zračenja crnog tijela i strukture atoma, kao i fizike čvrstog stanja, fotoelektričnog efekta itd.

Do konca XIX stoljeća nakupilo se vrlo mnogo eksperimentalnih podataka o **atomskim spektrima**. Ti su podaci pokazali da se atomski spektri sastoje od skupova (serija) **diskretnih linija** - v. Sliku 1. Balmer je 1885. g. otkrio [1] da se valne duljine λ_n, odnosno frekvencije ν_n, serije spektralnih linija ($n = 3, 4, 5, 6, ...$) iz vidljivog dijela spektra atoma vodika mogu opisati zapanjujuće točno zajedničkom formulom

$$\lambda_n \;=\; b\,\frac{n^2}{n^2-2^2} \qquad (b = 3645,6\,\text{Å}), \tag{1.1}$$

gdje je n prirodan broj ($n \in \mathbb{N}$) veći od 2.

*Kratke životopise Maxa Plancka i Alberta Einsteina možete naći u knjižici "Kvantni start: oprezni Planck i radikalni Einstein" D. Klabučara, Exp Edit 2005.



Slika 1.1: Primjeri diskretnih spektara. Prvi odozgora je dio Fraunhoferovog, apsorpcijskog spektra Sunca. Tamne linije nastaju zbog toga što atomi kemijskih elemenata prisutnih u Sunčevoj atmosferi apsorbiraju svjetlost samo nekih određenih valnih duljina. Slijede dijelovi emisijskih spektara atoma natrija, vodika, i napos-lijetku žive. Usporedba pokazuje da su linije tih spektara prisutne i u Sunčevom apsorpcijskom spektru. To je spektroskopski dokaz prisutnosti tih kemijskih elemenata u Sunčevoj atmosferi.
Ovdje valne duljine spektralnih linija nisu u linearnoj korespondenciji s horizontalnim razmacima na slici. Zato smo iznad slike označili mjesta koja odgovaraju valnim duljinama od 8, 7, 6, 5 i 4 tisuće Ångströma (oznaka Å), 1 Å$= 10^{-10}$ m. To omogućuje usporedbu Balmerove formule (1.1) za $n = 3, 4, 5, 6$ s prve četri linije u spektru atoma vodika.

Balmerova formula (1.1) je posebno jednostavna u Runge–Rydbergovom obliku za frekvencije,

$$\nu_n = \frac{c}{\lambda_n} = c\,\mathcal{R}_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (n \in \mathbb{N},\, n > 2), \tag{1.2}$$

gdje je c brzina svjetlosti u vakuumu, a $\mathcal{R}_{\mathrm{H}} \equiv 4/b = 1,097 \times 10^7\ \mathrm{m}^{-1}$ je tzv. *Rydbergova (spektroskopska) konstanta* (za vodik, H) izmjerena u spektroskopskim eksperimentima.

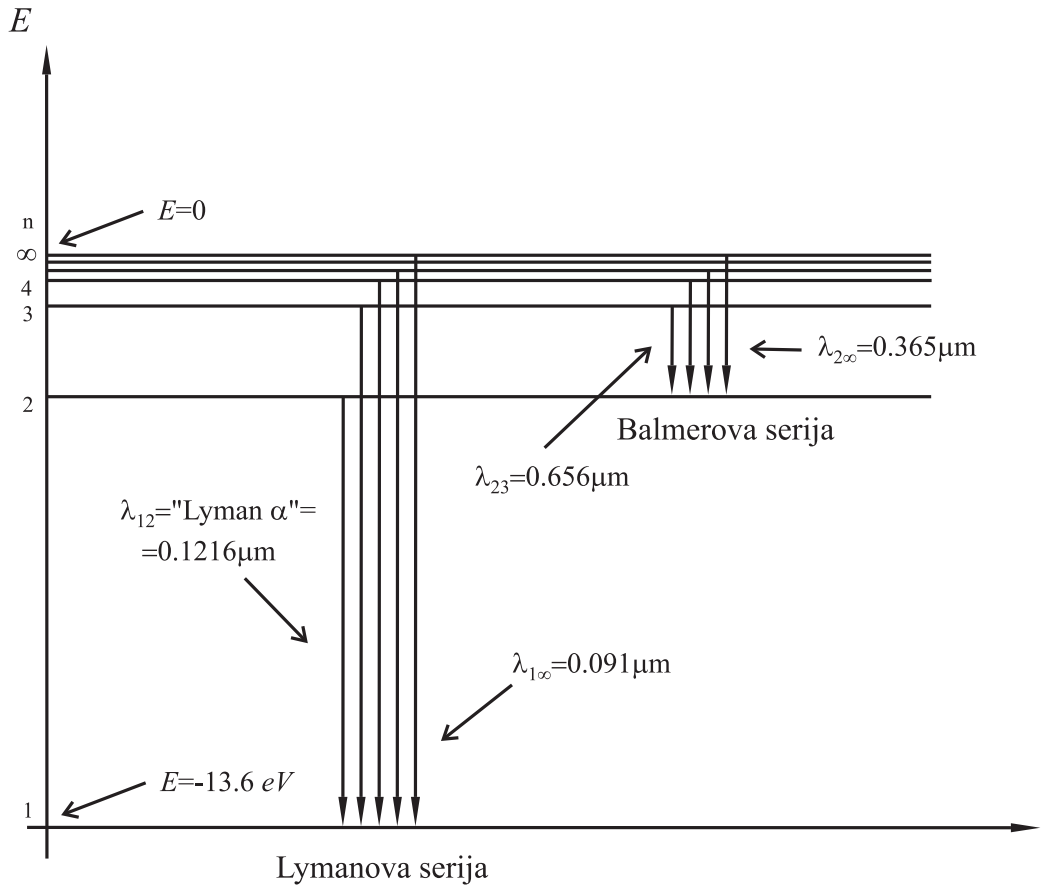
Rydberg, Kaiser i Runge iscrpno su proučavali spektre raznih atoma koncem XIX stoljeća. Paschen je 1908. godine otkrio seriju spektralnih linija atoma vodika koje su padale u infracrveni dio spektra, a Lyman 1914. seriju u ultraljubičastom dijelu spektra atoma vodika. Fascinantno je bilo to da se i Lymanovu i Paschenovu seriju moglo opisati formulama vrlo sličnim onoj koju je ranije pronašao Balmer za vidljivi dio spektra. Općenito, za n-tu spektralnu liniju u m-toj seriji, frekvencija elektromagnetskih valova emitiranih iz atoma vodika je

$$\nu_{mn} = \frac{c}{\lambda_{mn}} = c\,\mathcal{R}_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \equiv T_m - T_n \qquad (m, n \in \mathbb{N},\, n > m). \tag{1.3}$$

($m = 1$ odgovara Lymanovoj seriji, $m = 2$ Balmerovoj, $m = 3$ Paschenovoj, $m = 4$ Brackettovoj (1922. g.), $m = 5$ Pfundovoj seriji (1924. g.), itd.) Uočavajući te pravilnosti među raznim serijama vodikovog atoma, Ritz je 1908. formulirao svoj slavni **kombinacioni princip**, koji vrijedi ne samo za najjednostavniji atom - vodik, nego i za atome drugih elemenata, iako za njih **termovi** T_m, T_n, nisu tako jednostavni kao oni vodikovi definirani u formuli (1.3). Prema tom principu, nove se spektralne linije mogu naći kao aditivne ili suptraktivne kombinacije dvije već poznate spektralne linije na način

$$\nu_{mn} = \nu_{mn'} - \nu_{nn'} = (T_m - T_{n'}) - (T_n - T_{n'}) = T_m - T_n\,. \tag{1.4}$$

Naravno, danas to razumijemo (vidi Sliku 1.2) kao jednostavnu posljedicu emisije kvanta elektromagnetske energije zbog prelaska elektrona iz n-te u m-tu *diskretnu* energijsku razinu ("nivo") atoma ($E_n = hT_n$), te Planckove veze između frekvencije i energije tog kvanta, $E = h\nu$. Tu je Planck uveo do tada nepoznatu prirodnu konstantu, to jest, **potpuno novu temeljnu fizikalnu skalu** – Planckovu konstantu h. Međutim, sve do Bohrovog modela 1913. godine (vidi sekciju 5.2), formule (1.3) i (1.4) nisu se dale objasniti.



Slika 1.2:
Shematski prikaz nastanka prve dvije serije ($m = 1$, Lymanove, te $m = 2$, Balmerove) spektralnih linija atoma vodika zbog prijelaza elektrona iz n-te u m-tu diskretnu energijsku razinu. Valne duljine λ_{mn} date su u mikrometrima, 1 μm = 10^{-6} m.

Zato je priroda postanka spektralnih linija ostala posve nejasna sve do tada. Potpuno zadovoljavajuće objašnjenje došlo je još kasnije, 1925. godine, sa Schrödingerovom jednadžbom odnosno s Heisenbergovom matričnom mehanikom.

Proučavajući **zračenje crnog tijela** (kojemu je posvećeno cijelo naše sljedeće poglavlje), Wien je 1896. izveo formulu koja se slagala s eksperimentalnim podacima za zračenja **visokih frekvencija**. Međutim, ta je formula bila neprimjenjiva za niže frekvencije. Rayleigh je u lipnju 1900. ukazao na to da klasična fizika vodi na gustoću zračenja crnog tijela koja bi monotono rasla kao kvadrat frekvencije i zato neizbježno davala apsurdne rezultate na višim frekvencijama (tzv. **"ultraljubičasta katastrofa"**), iako se odgovarajuća formula (Rayleigh-Jeansov zakon, prezentiran tek 1905.) dosta dobro slagala s eksperimentom za niske frekvencije.

Da bi opisao eksperimentalne rezultate za zračenje crnog tijela preko cijelog raspona frekvencija, od niskih preko srednjih do visokih, Planck je krajem 1900. predložio svoju slavnu, empirički točnu formulu [2]. Planckova formula prelazi u Wienovu odnosno Rayleigh-Jeansovu formulu kao granične slučajeve u području visokih odnosno niskih frekvencija zračenja. Ta Planckova formula sadrži jednu novu konstantu h, koju je on nazvao **elementarnim kvantom djelovanja**. Planck je naime shvatio da ako je njegova nova teorija radijacije zasnovana na fizikalnim idejama, taj kvant djelovanja h mora igrati fundamentalnu ulogu u fizici, i to tako da se reformuliraju dotadašnji pojmovi koji su se zasnivali na ideji kontinuiranosti. Planck je naime zaključio da ako se želi objasniti odnosno izvesti njegova formula koja je točno opisivala zračenje crnog tijela, mora se pretpostaviti da materija zrači energiju samo u diskretnim količinama, **kvantima**. Energija pojedinog kvanta elektromagnetskog zračenja mora biti jednaka $h\nu$, gdje je ν frekvencija elektromagnetskog zračenja.

Planck je za otkriće diskretnih kvanta energije dobio Nobelovu nagradu 1918. godine, kada su ispravnost i značaj kvantne ideje već postali široko prihvaćeni u znanstvenoj zajednici. Naravno, do toga nije došlo ni brzo ni lako, jer je postojanje diskretnih kvanta energije elektromagnetskog zračenja bilo u oštroj suprotnosti s klasičnom teorijom. To je duboko uznemiravalo i samog Plancka pa je naknadno čak nastojao formulirati [3] neke hibridne verzije svoje kvantne teorije kako bi je približio klasičnoj fizici koliko mu se

samo činilo mogućim. To je pridonijelo nastanku kontroverznih interpretacija povijesti znanosti koje Plancku osporavaju očinstvo kvantne hipoteze. Među njima su na primjer čak i utjecajni T. S. Kuhn [4], te O. Darrigol [5]. Oni prvi istinski uvid u fizikalni smisao kvantnog diskontinuiteta pripisuju Einsteinu. Takvo je stajalište pretjerano, ali je svakako točno da je Einstein, osobito svojom fotonskom hipotezom [6], u odnosu na Plancka produbio kvantnu hipotezu i shvaćanje njenih implikacija. To ćemo pojasniti u daljnjem tekstu, a naročito u poglavlju 3, koje se većinom bavi fotoelektričnim efektom.

Naime, radikalna formulacija kvantne fizike je dobivala sve više potvrda, a ponajprije tako što je pomoću nje Einstein 1905. g. dao brilijantno objašnjenje **foto-električnog efekta**. Štoviše, to objašnjenje je otišlo još i dalje: ono je zahtijevalo da i sâmo elektromagnetsko polje bude kvantizirano [6]. To znači da na *fundamentalnoj* ("mikroskopskoj") razini to polje nije klasični val, nego da se zapravo sastoji od diskretnih pobuđenja, "čestica svjetlosti" – fotona. To je, zbog inače fenomenalnog uspjeha Maxwellove klasične teorije, znanstvenicima bilo teško prihvatiti. Zato je tek otkrićem **Comptonovog efekta** (v. poglavlje 4) 1923. g., konačno postalo opće prihvaćeno da elektromagnetsko zračenje uz valna ima u izvjesnom smislu i čestična svojstva.

1.2 O širem kontekstu relevantnih spoznaja do 1913.

Prije nego što nastavimo o razvoju kvantne fizike kao takve, napravimo digresiju da napomenemo da je on naravno bio potpomognut i napretkom drugih područija znanosti. Izvrsna ilustracija za to su ona Einsteinova otkrića [7, 8, 9, 10] koja kao i hipoteza o kvantima svjetlosti [6] potječu iz njegove "čudesne godine" 1905. (U spomen te Einsteinove "annus mirabilis" je njena stogodišnjica, 2005. godina, proglašena Svjetskom godinom fizike.) Od tih radova, najkasnija dva [9, 10] posvećena su teoriji relativnosti, koja doduše za velik dio kvantnih pojava nije bitna, ali za dio jest, kao što ćemo kasnije vidjeti u poglavlju 4 gdje detaljno objašnjavamo gore spomenuti Comptonov efekt upravo upotrebom relativističkih relacija za energiju, impuls i masu. Odmah nam je međutim jasna relevantnost za kvantnu fiziku radova [7, 8] koji rabe hipotezu o postojanju mikročesticâ, naime atomâ i molekulâ, iako

same kvantne ideje ne rabe. Ne smijemo zaboraviti da do tada atomska hipoteza o strukturi materije, iako vrlo prisutna, niti u znanstvenim krugovima nije bila opće prihvaćena. Jedan od tih radova [7, 8], Einsteinova doktorska teza [7], pokazuje kako proučavanjem gibanja molekula u otopinama možemo izračunati ne samo Avogadrov broj nego i veličinu molekula. Još se važnijim pokazao njegov rad o Brownovom gibanju [8], jer nakon što je njegove predikcije tri godine kasnije eksperimentalno potvrdio Jean Perrin, više nije bilo nikakve sumnje da atomi i molekule doista postoje.

Ovime smo došli do mikroskopske strukture "prave" materije i pitanja kakvu ulogu tu igraju kvanti, dok smo do sada govorili o kvantnim idejama Plancka i Einsteina (do 1905. g.) koje su se ticale svjetlosti odnosno elektromagnetskog zračenja općenito.

Međutim, Einstein je 1907. godine u novom kontekstu uspješno primijenio Planckovu ideju kvantizacije enegije da bi riješio jedan važan problem u fizici čvrstog stanja koji je mnogo godina zbunjivao znanstvenike. To je bilo narušenje klasičnog Dulong-Petitovog zakona o toplinskom kapacitetu ("specifičnoj toplini"). Eksperimentalno nađena temperaturna ovisnost toplinskog kapaciteta krutina nije se mogla objasniti u okvirima klasične teorije. Tek kad je Einstein 1907. primijenio ideju kvantizacije ($E = h\nu$) na **energiju vibracija** atoma vezanih u **kristalnu rešetku**, uspjeli su on i P. Debye (koji je 1912. unaprijedio model) teorijski izvesti temperaturnu ovisnost toplinskog kapaciteta krutina koja se slagala s eksperimentom. Time su položili jedan od temelja moderne teorije čvrstog stanja.

Nadalje, **otkrićem radioaktivnosti** brzo je došlo i do uporabe radioaktivnih α-, β-, kao i elektromagnetskih (osobito γ- i X-) zraka u eksperimentima koji su počeli naročito uspješno početi razotkrivati strukturu materije. To se ne odnosi samo na ogib (difrakciju) X-zraka na kristalnim rešetkama, nego i na prodor *unutar* atoma. Naime, uočeno je da ako se *vrlo* tanke metalne folije bombardira snopovima β-čestica ili katodnim zrakama, t.j. elektronima, ti elektroni skreću vrlo malo ili nikako. Lenard[†] je zato istakao, da električno negativne β-čestice gotovo ništa ne zaustavlja pri prolazu kroz atom – dakle, da je **najveći dio prostora unutar atoma prazan**. Geiger i Marsden su 1908. započeli proučavati raspršenja α-čestica na tankim folijama teškog metala, konkretno zlata. Otkrili su da većina α-čestica prođe kroz folije bez otklona,

[†]Lenardu je 1905. dodijeljena Nobelova nagrada za istraživanja s katodnim zrakama.

tj. da se ne raspršii, dok su neke α-čestice - otprilike jedna od deset tisuća - vrlo snažno skrenute (za kut veći od 90°). Rutherford je 1911. zaključio da se takvi jaki odboji pojedinih α-čestica događaju ne kao rezultat mnogih sudara, nego jednog sudara s jednim jedinim atomom. Budući da su tako odbijene α-čestice rijetke u odnosu na broj onih koje uopće nisu otklonjene i koje kao da su prošle kroz prazan prostor, mora biti da su centri raspršenja smješteni u vrlo malom prostoru u središtu atoma, da su vrlo teški u odnosu na α-čestice pa je dakle u njima koncentrirana gotovo sva masa atoma, te da im je naboj istog predznaka kao α-česticama, tj. pozitivnog. Rutherford je taj zaključak uspio i kvantitativno precizirati izvodom tzv. Rutherfordovog udarnog presjeka, pokazavši da se eksperimentalna kutna raspodjela zaista slaže s onom, koja se teorijski dobije iz pretpostavke da α-čestice interagiraju s masivnim centrima raspršenja naboja $+Ze$ (gdje je Z atomski broj, za koji se poslije ustanovilo da je jednak broju protona u jezgri). Zahvaljujući tom zaključku Rutherford je 1913. formulirao svoj **planetarni** (ili jezgreni) **model** atoma. Po tom modelu, oko teške i u atomskim razmjerima sićušne pozitivno nabijene jezgre kruže (kao planeti oko Sunca) lagani, negativno nabijeni elektroni koji čine atom električno neutralnim. Međutim, frekvencije zračenja koje se po klasičnoj elektrodinamici očekuju od tako orbitirajućih elektrona, ne odgovaraju empirički ustanovljenoj diskretnoj strukturi (1.4) spektralnih linija, na pr. balmerovskoj ovisnosti (1.3) o cijelim brojevima u slučaju atoma vodika. Osim toga, stabilnost takvih atoma je bila misterij jer nije bilo jasno zašto ti elektroni kružeći ne zrače (i to kontinuiran spektar) i time ne gube energiju, te konačno ne padnu na jezgru. To bi se prema klasičnim računima moralo dogoditi vrlo brzo, za oko 10^{-11} sekundi za atom tipične veličine reda jednog Ångströma (oznaka Å), 1 Å= 10^{-10} m.

1.3 Skica prve faze razvoja kvantne fizike

Iznijeli smo kako se, od kraja XIX stoljeća do 1913. godine, nakupio velik broj eksperimentalnih rezultata koji se nisu mogli objasniti na temelju postojeće teorije: otkriće diskretnih linija poredanih u pravilne serije u atomskim spektrima, fotoelektrični efekt, toplinski kapacitet plinova, toplinski kapacitet krutina i zračenje crnog tijela. Sve je to ukazivalo na kvantizaciju energije. Nakon što je Rutherford predložio svoj planetarni model atoma [11], Niels

Bohr je 1913. povezao te činjenice i ideje u - bar na prvi pogled - donekle konzistentnu kvantnu teoriju atoma [12]. U sekciji 5.2 ćemo objasniti kako je Bohr, povezujući planetarni model atoma s idejom kvantizacije, dao zakon za frekvencije zračenja vodikovog atoma koji je objašnjavao Ritzov kombinacioni princip i Balmerovu formulu te omogućio izračunavanje Rydbergove konstante. Bohrovu teoriju, ili točnije **Bohrov model**, je dalje uspješno razvijao i poopćavao i on sâm, kao i Sommerfeld, Debye i drugi. Idejom "kvantnih skokova" između raznih kružnih ili eliptičnih "planetarnih orbita" elektrona u atomu uspjelo se objasniti i sistematizirati golemu količinu eksperimentalnih podataka o spektralnim linijama. Isto tako, formuliranjem principa korespondencije postalo je jasno da kvantna teorija daje u makroskopskom limesu klasičnu fiziku.

Međutim, do 1922., unutrašnje inkonzistencije i ograničenja te tzv. "stare kvantne teorije" postala su očigledna. Novi razvoj bio je potaknut idejama o valno-čestičnoj dvojnosti prirode kvantnih objekata.

Otkriće (1923. g.) već spomenutog **Comptonovog efekta** [13], naime promjene valne duljine elektromagnetskog zračenja ($X-$ i γ-zraka) nakon raspršenja na česticama materije (elektronima), potvrdilo je Einsteinovu hipotezu o kvantima elektromagnetskog polja [6]. Postalo je nepobitno da elektromagnetska radijacija ima neklasičnu, dvojnu prirodu, jer uz valna ima u nekom smislu i čestična svojstva. Točnije, **kvanti elektromagnetskog zračenja, fotoni, imaju i čestična svojstva i moraju se svrstati među elementarne čestice**.

To je imalo odlučujući utjecaj na dovršenje utemeljenja kvantne mehanike. Prvo je de Broglie 1923-24. predložio [14] da se takva **valno-čestična dvojnost (dualnost)** protegne na sve mikročestice, t.j. da su i valna i čestična svojstva pridružena svakoj čestici. (Te su ideje dobile čvrstu eksperimentalnu potvrdu 1927. kad su Davisson i Germer i još neki istraživači pronašli interferenciju elektrona upotrebljavajući kristale kao fine difrakcione rešetke.) De Broglie je 1925. uveo pojam "valna funkcija". Schrödinger je ubrzo (1925-26.) formulirao svoju valnu diferencijalnu jednadžbu za valnu funkciju i riješio je za vodikov atom [15]. Time je pokazao kako se **kvantizaciji** može pristupiti kao **problemu svojstvenih vrijednosti** jer su **valne funkcije** koje opisuju neki sustav svojstvene funkcije **Schrödingerove jednadžbe** za taj sustav, a odgovarajuće svojstvene vrijednosti su upravo energije koje može imati

taj sustav. Tako je konačno i u potpunosti razotkrio tajnu porijekla balmerovskih formula (1.1),(1.2),(1.3) za spektar vodikovog atoma. Schrödingerova "valna mehanika" je prihvaćena s oduševljenjem jer je omogućila da se kvantno-mehaničkim problemima sistematski pristupa dobro poznatim i jasno definiranim metodama matematičke fizike.

Ipak, ispravno tumačenje fizikalnog smisla valne funkcije uzelo je još neko vrijeme. Nije se npr. ispunilo očekivanje samog Schrödingera da je kvadrat valne funkcije naprosto gustoća naboja elektrona, niti vrlo slično de Broglievo ranije tumačenje da su to "valovi materije", a oboje bi kvantnu valnu mehaniku približilo klasičnoj fizici valnih pojava. Međutim je Max Born 1927. predložio **probabilističku interpretaciju** valne funkcije. To je tumačenje njenog fizikalnog značenja izbjeglo kontradikcije kakve su mučile druge interpretacije i koje je izdržalo sve kritike i testove, te konačno postalo općeprihvaćeno. Valna je funkcija po Bornu matematički opis **valova vjerojatnosti**, a ne valova gustoće materije ili gustoće naboja. Drugim riječima, valnu funkciju u nekoj točki (koordinatnog ili impulsnog prostora) možemo interpretirati kao **amplitudu vjerojatnosti** i njen apsolutni kvadrat povezati s **gustoćom vjerojatnosti** nalaženja mikro-čestice (na pr. elektrona) u toj točki. (To je zrela formulacija kvantnog dualizma, koji se začeo upravo teorijskim objašnjenjima zračenja crnog tijela i foto-efekta, koja ćemo detaljno izložiti u sljedeća dva poglavlja. Štoviše, Planckova i Einsteinova objašnjenja ta dva fenomena začetak su i daljnjih razvoja kvantnih ideja, naime **kvantne teorije polja**.)

Zaokružimo ovaj uvod s nekoliko dodatnih pojašnjenja. Tema ove knjige su samo začeci kvantne fizike, pa u gornjem povijesnom pregledu nismo bili u prilici niti spomenuti mnoge bitne momente u razvoju kvantne fizike, a neke smo dosad samo spomenuli. Jedan od njih je Heisenbergova "matrična mehanika". To je alternativni pristup kvantnoj fizici, pa je njegovo formuliranje vrlo pomoglo razbistravanju fundamentalnih pojmova. Matrična mehanika je zapravo predložena i prije Schrödingerove valne mehanike, kada je 1925. Heisenberg (uz kasniju pomoć Borna i Jordana) svakoj kvantiziranoj dinamičkoj varijabli pridružio **matricu** čije su svojstvene vrijednosti u stvari eksperimentalno opažene vrijednosti dotične varijable. Tim pristupom se spektar vodikovog atoma zapravo riješio prije nego preko Schrödingerove valne jednadžbe, iako je ovo posljednje tehnički lakše. Također je značajno da se Heisenbergove matrične jednadžbe gibanja mogu formalno povezati s

klasičnim jednadžbama ako se Heisenbergovi komutatori matrica poistovjete s Poissonovim zagradama u kanonskim jednadžbama gibanja klasične mehanike.

U prvi je čas izgledalo da je pojavom Schrödingerove valne mehanike 1926. Heisenbergova matrična mehanika dobila kao alternativu posve nezavisnu i različitu teoriju. Međutim, pokazivalo se da su im predviđanja za mjerljive veličine jednaka, pa se počelo shvaćati da su te teorije zapravo ekvivalentne. Da su to dvije različite matematičke formulacije iste kvantne teorije, rigorozno je pokazao von Neumann 1929. (Na primjer, bilo da se radi o diferencijalnoj ili matričnoj jednadžbi, računanje energijskih razina vezane mikročestice (elektrona) reduciralo se na matematički jasno definiran problem nalaženja svojstvenih vrijednosti.)

Heisenberg je 1927. uveo u kvantnu teoriju i svoje **relacije neodređenosti** koje kažu da nije moguće do proizvoljne preciznosti odrediti istovremeno sve varijable koje karakteriziraju mikročestice, već samo neke. Na primjer, što preciznije elektronu određujemo njegov položaj, to veću neodređenost unosimo u njegov impuls, i obratno. Te relacije od najdublje fundamentalne važnosti znače konačni raskid kvantne mehanike s klasičnim determinizmom kakav vlada u klasičnoj mehanici ili elektromagnetizmu, te fundiranje kvantne mehanike kao teorije probabilističkog, statističkog tipa.

Već prije 1927. izvršena su i neka druga otkrića koja nismo još spomenuli, a od fundamentalne su važnosti za kvantnu fiziku, kao npr. otkriće **spina elektrona**, Bose-Einsteinove i Fermi-Diracove **kvantne statistike**, Paulijevog **principa isključenja** za fermione i dr. Tako možemo reći da je do 1930. uglavnom zaokružen fundamentalno-konceptualno-matematički okvir **nerelativističke kvantne mehanike**, iako su neki aspekti još uvijek predmet proučavanja i rasprava, kao npr. teorija mjerenja, a osobito razne interpretacije kvantne mehanike. Time se misli na pokušaje da se objasni odnos kvantne mehanike kao matematičke teorije s empiričkom realnosti [16, 17].

Osobito je dinamičan razvoj kvantne fizike u smislu iznalaženja novih metoda i primjena. To će ostati i ubuduće, jer je primjenjivost golema u područjima kao što su kemija, znanost o materijalima, elektronika i tehnologija općenito.

Priroda se međutim pokazala toliko bogata u svojoj pojavnosti da je i

kvantna mehanika nedovoljna da bi opisala sve fundamentalne fenomene. Zato se moralo prijeći i njene okvire, baš kao što je ona nastala transcendiranjem klasične fizike. Ta proširenja su **relativistička kvantna mehanika** i **kvantna teorija polja**. Ona međutim izlaze daleko izvan okvira ove knjige, koja će se samo dotaći nekih njihovih aspekata kada to bude i potrebno i lagano.

1.4 Zadaci 1

1.1.) Izračunajte frekvencije i valne duljine dviju prvih linija u Lymanovoj ($m = 1$), Balmerovoj ($m = 2$), Paschenovoj ($m = 3$), Brachettovoj ($m = 4$) i Pfundovoj ($m = 5$) seriji spektra atoma vodika.

1.2.) Nađite granične vrijednosti frekvencijâ i valnih duljinâ u Lymanovoj, Balmerovoj, Paschenovoj, Brachettovoj i Pfundovoj seriji vodikovog spektra.

1.3.) Recimo da elektromagnetsko polje titra s periodom od: a) 1 milisekunde, b) 1 mikrosekunde (AM radio-valovi, tj. oni korišteni za amplitudnu modulaciju), c) 1 nanosekunde = 10^{-9} s, d) 10^{-19} sekundi (rendgenske, tj. X-zrake korištene za medicinsku dijagnostiku). Najprije nađite odgovarajuću frekvenciju ν i valnu duljinu $\lambda = c/\nu$ za svaki od ovih slučajeva, a onda i energiju jednog fotona koristeći Planckovu relaciju $E = h\nu$. Možete koristiti približne vrijednosti za brzinu svjetlosti $c \approx 300000$ km/s i za Planckovu konstantu $h \approx 6.63 \times 10^{-34}$ J s. Pretpostavimo zatim da izvor tog elektromagnetskog polja ima snagu jednog Watta (W). Koliko fotona u sekundi on zrači u slučaju a), b), c) i d)?

1.4.) Na sličan način kao u prethodnom zadatku, nađite broj fotona emitiranih za jednu sekundu iz izvora snage jednog miliwatta (mW), energiju jednog od tih fotona, te frekvenciju i period ako je valna duljina: a) 60 nm (ultraljubičasto zračenje), gdje 1 nm = 1 nanometar = 10^{-9} m, b) 555 nm (središte vidljivog spektra), c) 17.4 μm = 17.4×10^{-6} m (maksimum infracrvenog zračenja na sobnoj temperaturi), d) 1.87 mm (pozadinsko kozmičko zračenje uslijed "Velikog praska"), e) 12.2 cm (zračenje u mikrovalnoj pećnici).

1.5.) Da se priviknete na energijske jedinice zvane elektronvolt (eV), kiloelektronvolt (keV) i megaelektronvolt (MeV), gdje 1 MeV = 10^3 keV = 10^6 eV $\approx 1.602 \times 10^{-13}$ J, nađite frekvenciju i valnu duljinu fotona energije: a) 1 eV, b) 1 keV, c) 1 MeV. Također, prođite ponovo zadatke 1.3. i 1.4., ali koristeći fizičarima zgodnu energijsku jedinicu eV umjesto standardne SI jedinice J (Joule).

1.6.) Nađite energije fotona emitiranih pri kvantnim skokovima koji dovode do spektralnih linija opisanih u zadacima 1.1. i 1.2. Izrazite te energije i u Joule-ima i u elektronvoltima.

1.7.) Nađite maksimalnu valnu duljinu fotona koji može izazvati raspad molekule čija energija vezanja iznosi 10 eV.

1.8.) Izvedena SI jedinica za radioaktivnost je becquerel, simbol Bq. To je na makroskopskoj skali vrlo mala jedinica, jer je becquerel definiran kao aktivnost neke količine radioaktivnog materijala u kojemu se događa jedan raspad u jednoj sekundi, to jest 1 Bq = 1 s^{-1}. Odgovorite: a) Kako se becquerel razlikuje od hertza (Hz), tj. od izvedene SI jedinice za frekvenciju, kada se izražavaju potpuno jednako preko temeljne SI jedinice za vrijeme: 1 Hz = 1 s^{-1}. b) Koliko jedna inverzna mikrosekunda μs^{-1} (odnosno milisekunda) iznosi hertza, a koliko becquerela?

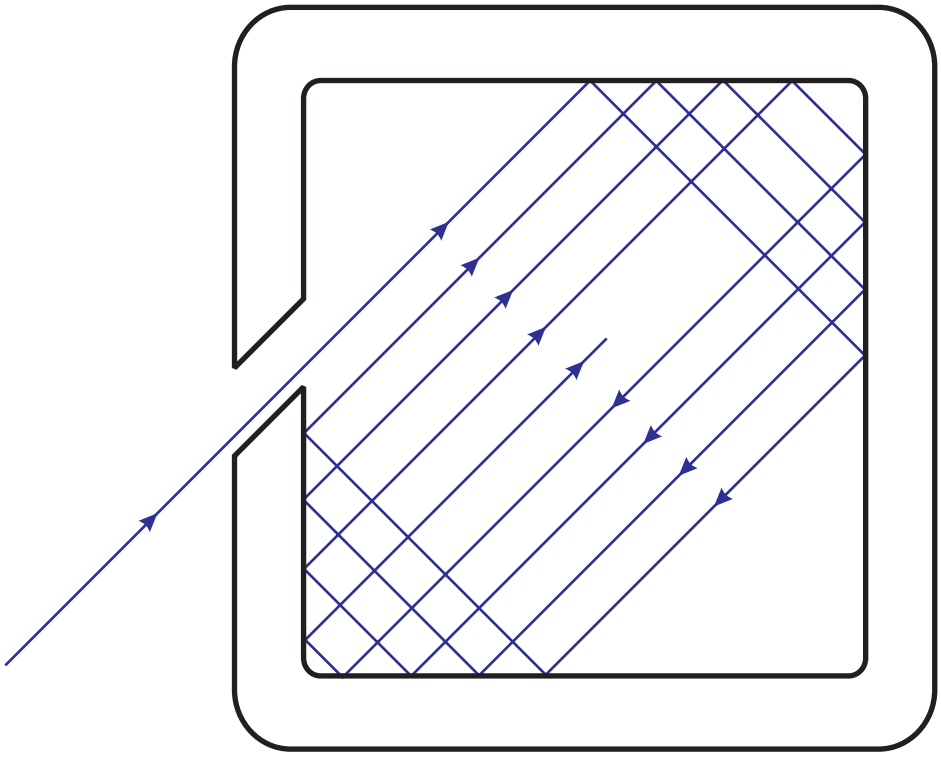
Poglavlje 2

Zračenje crnog tijela

Spektakularan primjer besmislenog rezultata klasične fizike je problem spektralne distribucije zračenja crnog tijela. To je ujedno i najmarkantniji primjer razrješenja problema zahvaljujući uvođenju Planckove kvantne hipoteze, već i zato što je tako dobivena prva kvantnomehanička formula uopće – naime Planckov zakon zračenja (2.34).

2.1 Definicija crnog tijela i njegovog zračenja

Najbolji emiter zračenja je ono tijelo koje je najbolji apsorber – to je jednostavan rezultat ravnotežne termodinamike. Idealni apsorber se u fizičarskom žargonu naziva "crno tijelo", a jedna jednostavna realizacija koja izvrsno aproksimira takav idealni apsorber – pa prema tome i idealni emiter – je maleni *otvor* na inače zatvorenoj, iznutra začađenoj šupljini (v. Sliku 2.1). Postavimo to u veliku pećnicu koju držimo na stalnoj temperaturi T, i pričekamo da začađena šupljina dođe s njom u toplinsku ravnotežu. Tada je i elektromagnetsko zračenje unutar šupljine u termičkoj ravnoteži sa zidovima šupljine, pa koliko ga zidovi apsorbiraju, isto ga toliko vraćaju natrag u šupljinu emitirajući zračenje. Dakle, u termičkoj ravnoteži na temperaturi T, u šupljini se nalazi stalan iznos energije zračenja, koji po jedinici volumena označimo s U_T. Njemu doprinose svi *modovi* titranja (to jest, *nezavisni* – po frekvenciji i polarizaciji – *načini* titranja) elektromagnetskog polja, dakle



Slika 2.1: Na nekoj zatvorenoj šupljini načinimo malen otvor smješten s obzirom na geometriju šupljine tako, da svjetlo nakon ulaska mora pretrpjeti mnogo uzastopnih refleksija prije nego opet naiđe na otvor. Ako stijenke šupljine jako apsorbiraju svjetlo (recimo zato što su začađene), očito će zanemarivo malo svjetla koje je ušlo kroz otvor, iz njega izići. Zato je takav otvor gotovo idealan apsorber, t.j., vjerojatno najbolja realizacija idealnog crnog tijela.

zračenje svih frekvencija, pa pišemo

$$U_T = \int_0^\infty u_T(\nu) d\nu \tag{2.1}$$

gdje je $u_T(\nu)d\nu$ iznos energije zračenja frekvencije ν unutar infinitezimalnog frekventnog intervala $d\nu$. Funkciju $u_T(\nu)$ nazivamo spektralnom gustoćom energije zračenja ili frekventnom distribucijom gustoće energije zračenja. Ta se spektralna gustoća može dati – što je naravno posve ekvivalentno – i kao funkcija valne duljine $\lambda = c/\nu$ (c je brzina svjetlosti u vakuumu). Vezu između te nove funkcije $\widetilde{u}_T(\lambda)$ i frekventne distribucije $u_T(\nu)$ nalazimo pomoću relacije $d\nu = -c\, d\lambda/\lambda^2$, te uvjeta da funkcija $\widetilde{u}_T(\lambda)$ mora u integralu po valnim duljinama λ dati istu gustoću energije U_T kao što je daje integral po frekvencijama (2.1). Odmah slijedi veza (vidi zadatak 2.1)

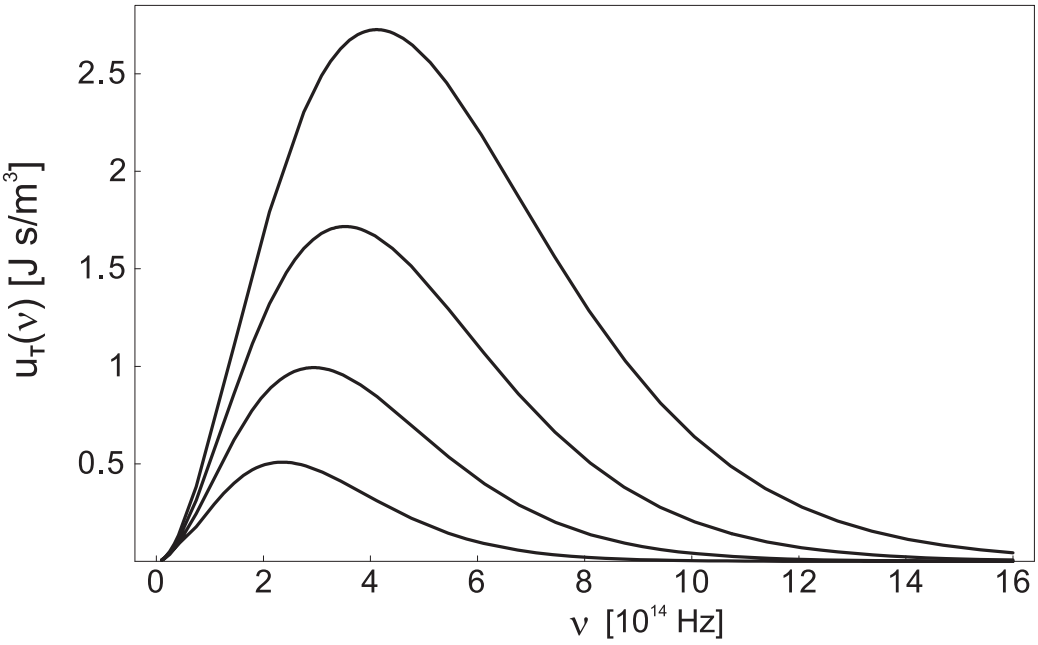
$$\widetilde{u}_T(\lambda) = u_T(\nu)\frac{c}{\lambda^2} = u_T(c/\lambda)\frac{c}{\lambda^2}. \tag{2.2}$$

Eksperimentalno se šupljinska spektralna gustoća $u_T(\nu)$ (odnosno $\widetilde{u}_T(\lambda)$) dobiva tako da se detektira i mjeri zračenje iz otvora na zidu šupljine koja je u termodinamičkoj ravnoteži na temperaturi T. Naime, egzaktno geometrijsko razmatranje dokazuje (vidi riješeni zadatak 2.2 u knjizi R.L. Liboffa [18]) da je izračena snaga po jedinici površine, t.j. energija izračena u jedinici vremena iz otvora jedinične površine, dana s $\mathcal{S}_T = (c/4)U_T$, kao i da je spektralna gustoća izračene snage (t.j. frekventna distribucija te snage) $\mathtt{s}_T(\nu)$ na isti način proporcionalna šupljinskoj spektralnoj gustoći:

$$\mathtt{s}_T(\nu) = \frac{c}{4}\, u_T(\nu)\,, \qquad \text{te} \quad \text{naravno} \qquad \mathcal{S}_T = \int_0^\infty \mathtt{s}_T(\nu) d\nu\,. \tag{2.3}$$

Tako su Lummer i Pringsheim 1899. i 1900, a Rubens i Kurlbaum 1900. godine, izmjerili $u_T(\nu)$ s dovoljnom točnošću da klasičnu teoriju stave na odlučnu kušnju.

Za nekoliko vrijednosti parametra temperature T, rezultati eksperimenata takvog tipa prikazani su na Slici 2.2. Iz razloga datih gore, te krivulje možemo u izvrsnoj aproksimaciji smatrati spektralnom gustoćom energije zračenja crnog tijela. Pitanje je možemo li ih dobiti i teorijski.



Slika 2.2: Spektralne gustoće energije elektromagnetskog zračenja $u_T(\nu)$, u jedinicama 10^{21} Joule $\cdot$ s/m^3, za četiri temperature: $T = 4000$ K, $T = 5000$ K, $T = 6000$ K i $T = 7000$ K. Frekvencije ν su date u jedinicama 10^{14} Hz. (Ljudima vidljivi dio spektra je otprilike između 4 i $8 \cdot 10^{14}$ Hz.) Kako temperature rastu, dobivamo sve više krivulje, a maksimumi im se pomiču na veće frekvencije.

2.2 Dometi klasične teorije. Ultraljubičasta katastrofa

Wien je 1893. iz termodinamičkih razmatranja izveo svoj "zakon pomaka", prema kojemu se ona frekvencija, odnosno ona valna duljina $\lambda = c/\nu$ za koju je spektralna gustoća energije zračenja crnog tijela maksimalna, nalazi na vrijednosti λ_{max} koja ovisi samo o temperaturi crnog tijela:

$$\lambda_{max} = \frac{\text{konstanta}}{T} \,. \tag{2.4}$$

Tim općenitim termodinamičkim razmatranjima Wien je pokazao da funkcijska ovisnost spektralne gustoće energije mora biti oblika

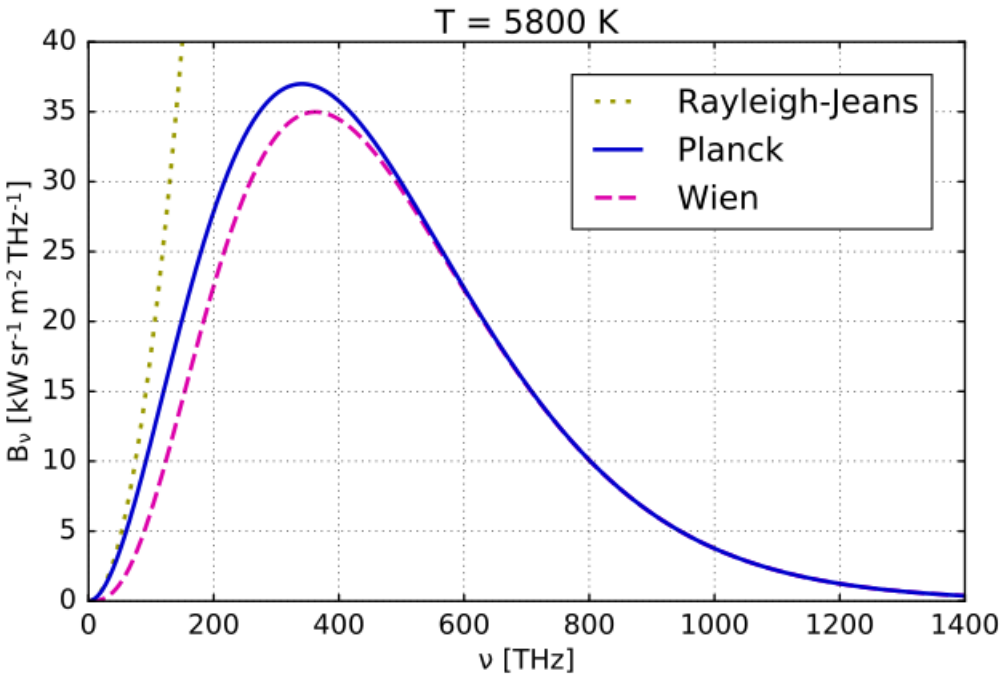
$$\widetilde{u}_T(\lambda) = \frac{W(\lambda T)}{\lambda^5} \,, \quad \text{odnosno} \quad u_T(\nu) = W(cT/\nu)\,\frac{\nu^3}{c^4} \;=\; W(\nu/T)\,\frac{\nu^3}{c^4} \tag{2.5}$$

(gdje zadnja jednakost opominje da je množenje konstantom argumenta funkcije W u principu irelevantno, kao i izbor potencije ± 1 argumenta ν/T). No u toj općenitoj formuli (2.5) je funkcija $W(\lambda T)$ tada ostala neodređena, jer se njen oblik nije mogao odrediti samo iz termodinamičkih razmatranja. Da bi se dobili konkretni rezultati o tome što bi funkcija $W(\lambda T)$ mogla biti, bile su potrebne neke pretpostavke o mehanizmu nastanka zračenja.

Prva mjerenja su bila na kratkim valnim duljinama, $\lambda < \lambda_{max}$, odnosno na visokim frekvencijama. Te je eksperimentalne rezultate Wien uspješno opisao uvrstivši u (2.5) konkretan oblik funkcije $W(\lambda T) = K_1 \exp(-K_2/\lambda T)$, naravno uz vrijednosti konstanti K_1 i K_2 koje su bile prilagođene ("fitane") tim eksperimentalnim podacima. Dakle, specifičniji oblik (iz 1896.) Wienovog zakona zračenja je

$$\widetilde{u}_T^{(\mathrm{W})}(\lambda) = K_1 \frac{e^{-K_2/\lambda T}}{\lambda^5} \,, \quad \text{odnosno} \quad u_T^{(\mathrm{W})}(\nu) = \frac{K_1}{c^4}\,\nu^3\, e^{-K_2\nu/cT} \,. \tag{2.6}$$

Za takav konkretan oblik zakona zračenja crnog tijela Wien je pomoću nekih pretpostavki (o kojima nešto više kasnije) dao i teorijski izvod specifičnog Wienovog zakona (2.6). No on zbog tih modelskih pretpostavki ima mnogo manju "teorijsku težinu" od općenitog oblika Wienovog zakona (2.5). Zato, kada su dobiveni i precizni eksperimentalni rezultati za veće valne duljine, odnosno srednje i niske frekvencije, pa se vidjelo da se s njima Wienov zakon



Slika 2.3: Usporedba Wienovog, Planckovog i Rayleigh-Jeansovog zakona zračenja crnog tijela, jer $\mathtt{B}_\nu \propto u_T(\nu)$ na temperaturi $T = 5800$ K. Planckova krivulja ujedno predstavlja i eksperimentalne podatke.

(Izvor:By Geek3 - Own work, CC BY-SA 4.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=63729413)

(2.6) ne slaže dovoljno dobro (vidi Sliku 2.3), to nije bilo zabrinjavajuće po stanje teorije.

Drugačije, i to katastrofalno drugačije, stoje stvari s najvažnijim pokušajem da se izvede $u_T(\nu)$ na temelju pretpostavki klasične fizike. On je doveo do **Rayleigh–Jeansovog** (RJ) **zakona zračenja**, naime

$$u_T^{(\mathrm{RJ})}(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\, k_B T\,, \tag{2.7}$$

gdje je $k_B = 1.381 \times 10^{-23}$ J/K Boltzmannova konstanta. Rayleigh–Jeansov zakon prezentiran je tek 1905., *nakon* Planckove formule (2.34). Dakle, ovdje ne izlažemo povijesni, nego konceptualno-logički razvoj od klasičnih prema kvantnim shvaćanjima i pojmovima.

Najprije ćemo detaljno prodiskutirati Rayleigh–Jeansovu formulu iako ćemo neke detalje izvoda prepustiti zadacima za vježbu. Ta klasična formula (2.7) za gustoću zračenja u šupljini koja predstavlja crno tijelo, može se već u početnim fakultetskim kolegijima izvesti iz pretpostavke da zračenje u toj šupljini potječe od oscilacija naboja vezanih harmoničkim silama [19] u materijalu zidova. Tu je pretpostavku upotrijebio i Planck pri izvodu svoje točne formule (2.34) za spektralnu raspodjelu zračenja po frekvencijama, jer po klasičnoj elektrodinamici, elektromagnetski val frekvencije ν dobivamo vibracijama naboja na istoj toj frekvenciji. Zato bi trebalo da električni naboj na neki način oscilira po putanji opisanoj harmoničkim funkcijama sinus i kosinus perioda $\tau = 1/\nu$. Dakle, općenita superpozicija $\sin\phi(t)$ i $\cos\phi(t)$ gdje je faza $\phi(t) = 2\pi\, t/\tau = 2\pi\,\nu\, t$:

$$x(t) \;=\; A\,\sin\left(2\pi\,\frac{t}{\tau}\right) + B\,\cos\left(2\pi\,\frac{t}{\tau}\right) \;=\; x_{\max}\,\sin\left(2\pi\,\nu\, t \;+\; \eta\right)\,. \tag{2.8}$$

(Za vježbu, izrazite maksimalnu elongaciju, tj. amplitudu $x_{\max}$ i početnu fazu η preko koeficijenata superpozicije A i B. Početna faza η nam je sada nebitna, te ovdje možemo postaviti početni uvjet $\eta = 0$.) Takvu putanju (2.8) dobivamo kao rješenje jednadžbe gibanja harmoničkog oscilatora s prirodnom frekvencijom ν, odnosno prirodnom kružnom frekvencijom $\omega = 2\pi\,\nu = 2\pi/\tau$:

$$\frac{d^2\,x(t)}{dt^2} \;=\; -(2\pi\,\nu)^2\,x(t) \;\equiv\; -\,\omega^2\,x(t)\,. \tag{2.9}$$

Nekome se ta pretpostavka može činiti previše specijalizirana to jest modelski ovisna, tako da ne može dovesti do neke općenite predikcije; ili može

izgledati previše nategnuta, tako da možda dovede do spurioznih rezultata. Ali, prisjetimo se da se gibanja vrlo kompliciranih sustava mogu analizirati preko rastava u normalne modove (za male pomake, kada međučestične sile u dobroj aproksimaciji možemo smatrati linearnim funkcijama pomaka od ravnotežne točke), a ti su normalni modovi ekvivalentni harmoničkim oscilatorima. Nadalje, odmah možemo uočiti jednu indiciju da je rezultat (2.7) zapravo vrlo općenit, a to je da naboj oscilatora, njegova masa i sva druga specifična svojstva nekog oscilatora, u njemu nisu prisutna – pokratila su se.

Sve to govorimo da objasnimo uspjeh takvog modelskog pristupa. No mnogo je važnije to, da se isti rezultat $u_T^{(\mathrm{RJ})}(\nu)$ (2.7), kao i Planckova empirički točna raspodjela $u_T(\nu)$ (2.34), može izvesti i rigorozno, bez te pretpostavke o harmoničkim oscilacijama naboja u materijalu zidova.

Po rezultatima ekvivalentan, ali konceptualno potpuno jasan (i zato sada najčešće korišten [20]) pristup zahtijeva razumijevanje da i u klasičnoj elektrodinamici **polje elektromagnetskog zračenja predstavlja skup harmoničkih oscilatora**. Naime, svaki normalni mod titranja polja na određenoj frekvenciji ν ima istu harmoničku vremensku ovisnost kao i putanja (2.8) mehaničkog harmoničkog oscilatora, jer zadovoljava istu jednadžbu gibanja (2.9) kao i ta putanja – vidi dolje elektromagnetski mod/val (2.11) koji je monokromatski, jer titra na jednoj određenoj frekvenciji ν. U Matematičkom dodatku A pak vidimo svaka se funkcija (pa i komponente elektromagnetskog polja) dade Fourierovom analizom izraziti kao odgovarajuća superpozicija normalnih modova, dakle sinusâ i kosinusâ poput (2.8), odnosno kompleksnih eksponencijalâ koje se mogu izraziti preko njih: $e^{\pm \mathrm{i}\phi} = \cos\phi \pm \mathrm{i}\,\sin\phi$.)

Naime, u odsutnosti naboja i njihovih struja, sve komponente vektorskog elektromagnetskog polja zadovoljavaju slobodnu valnu jednadžbu. To se odnosi i na vektorski potencijal $\mathbf{A}$, iz kojeg možemo izračunati električno polje $\mathbf{E}$ i magnetsko polje $\mathbf{B}$. Dakle, svaku komponentu tih polja možemo napisati po analogiji s transverzalnim valovima koji duž napete žice putuju u smjeru $+\infty$ i $-\infty$ brzinom v. Tada mod harmoničnog titranja s određenim vremenskim periodom $\tau = 1/\nu$ ima prostornu periodičnost $v\tau = v/\nu = \lambda$, što je valna duljina harmoničkog titranja u prostoru. Dakle, prostorno-vremenska ovisnost takvog harmoničkog, tzv. **monokromatskog vala određene valne duljine λ i frekvencije** $\nu = 1/\tau$ je, do na nebitan izbor početne faze, data funkcijom $f(\phi(x,t)) = f(2\pi\, x/\lambda \pm 2\pi\, t/\tau) = f(kx \pm \omega t)$ gdje je f sinusna

ili kosinusna funkcija, ili njima odgovarajuća kompleksna eksponencijala, a $k \equiv 2\pi/\lambda$ tzv. *valni broj*. Ta prostorno-vremenska ovisnost vrijedi bez obzira o kakvom se monokromatskom valu radi, jer takva $f(x,t)$ očito zadovoljava

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x,t) \;=\; \frac{1}{v^2}\,\frac{\partial^2}{\partial t^2} f(x,t) \qquad (\text{gdje } \; v = \frac{\lambda}{\tau} = \lambda\,\nu)\,, \tag{2.10}$$

a to je *valna jednadžba* poznata iz više područja klasične fizike.

Zato, ako se duž osi x širi mod elektromagnetskog vektorskog potencijala $\mathbf{A}$ frekvencije ν i njoj odgovarajuće valne duljine λ (u vakuumu, brzinom $\lambda\,\nu = c$), možemo napisati, na primjer,

$$\mathbf{A}_\nu(x,t) = \mathbf{e}_+\,A_+\,\cos\left[2\pi\left(\nu\,t - \frac{x}{\lambda}\right)\right] \;+\; \mathbf{e}_-\,A_-\,\cos\left[2\pi\left(\nu\,t + \frac{x}{\lambda}\right)\right]\;, \tag{2.11}$$

gdje je A_+ amplituda vala koji putuje u smjeru $+\infty$, a A_- amplituda vala koji putuje u smjeru $-\infty$. Njihovi odgovarajući jedinični vektori polarizacije $\mathbf{e}_\pm$ su transverzalni, tj. okomiti na smjer širenja vala: $\mathbf{e}_\pm \cdot \mathbf{e}_x = 0$, jer leže u ravnini $\langle yz\rangle$, pa $\mathbf{e}_\pm A_\pm = A_y^\pm\,\mathbf{e}_y + A_z^\pm\,\mathbf{e}_z$.

Ako $\mathbf{e}_+\,A_+ = -\,\mathbf{e}_-\,A_- \;\equiv\; \mathbf{e}_{yz}\,A$, zbog $\cos(a-b) - \cos(a+b) = 2\sin a \sin b$ se ta dva nasuprotno putujuća vala u (2.11) superponiraju u stojni val

$$\mathbf{A}_\nu(x,t) = \mathbf{e}_{yz}\,2A\,\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right)\,\sin\left(2\pi\nu\,t\right) \;\equiv\; \mathbf{e}_{yz}\,2A\,\sin\left(kx\right)\sin\left(\omega t\right)\;, \tag{2.12}$$

gdje $\mathbf{e}_{yz}\,2A \;\equiv\; A_y\,\mathbf{e}_y + A_z\,\mathbf{e}_z$, i gdje jasno vidimo ulogu (modula) valnog broja k kao (kružne) "frekvencije u prostoru". U vakuumu, $k = \omega/c = 2\pi\,\nu/c$.

Dolje će nam ključan biti broj nezavisnih stupnjeva slobode. Nezavisan način titranja elektromagnetskog vala je određen iznosom frekvencije (ili ekvivalentno, valne duljine odnosno valnog broja), te smjerom titranja vektora polja u transverzalnoj ravnini (pa su dva smjera polarizacije nezavisna), a za putujuće valove još i *smjer* širenja duž osi. Taj smjer zgodno opisuje predznak koji možemo pridodati valnom broju: $k_x = \pm k = \pm 2\pi/\lambda$. No, za stojne valove taj predznak nema značenja, jer tu imamo zapravo *modul* (veličinu) valnog broja, $k > 0$.

Na isti način kao (2.12), postoje i stojni modovi koji duž osi y i osi z titraju transverzalno na njih. Zato se gornji opis može, ne samo za putujuće nego

i za stojne valove, poopćiti na val $\mathbf{A}_\mathbf{k}(\mathbf{r},t)$ duž osi zadate općim trodimenzionalnim valnim vektorom $\mathbf{k} = k_x\mathbf{e}_x + k_y\mathbf{e}_y + k_z\mathbf{e}_z$. (Učinite to za vježbu, pomoću relacija $2\pi\nu = 2\pi c/\lambda = \omega = c|\mathbf{k}|$.)

Očito modovi elektromagnetskog polja i u slučaju putujućeg vala (2.11) i u slučaju stojnog vala (2.12) zadovoljavaju jednadžbu harmoničkog oscilatora (2.9) jednako kao i elongacija koordinate mehaničkog oscilatora $x(t)$ (2.8). Zato i na njih možemo primijeniti sve poznate rezultate koji se odnose na općeniti pojam harmoničkog oscilatora.

Elektromagnetsko se zračenje u šupljini – ako je zaista u termodinamičkoj ravnoteži sa zidovima te šupljine savršeno reflektirajućih zidova – mora sastojati od stojnih valova poput onog danog formulom (2.12). Rayleigh–Jeansov zakon (2.7) se neizbježno dobije kad se izračuna (v. riješeni Zadatak 2.5.) da **broj tih stojnih valova po jedinici volumena za svaku frekvenciju ν iznosi**

$$\mathcal{M}(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \tag{2.13}$$

i ako onda svakoj takvoj nezavisnoj vibraciji pridijelimo prosječnu energiju harmoničkog oscilatora s jednim stupnjem slobode

$$\langle E\rangle_{\text{klasična}} = k_B T \tag{2.14}$$

u skladu sa zakonom ekviparticije energije u klasičnoj statističkoj fizici, po kojemu i prosječna kinetička i prosječna potencijalna energija jednodimenzionalnog harmoničkog oscilatora iznose $\frac{1}{2}k_BT$, tj. ukupno (2.14).

Po Boltzmannovoj raspodjeli, vjerojatnost da neki stupanj slobode (tj. neki nezavisan način gibanja) ima energiju E je

$$P(E) = \frac{\mathrm{e}^{-E/k_BT}}{\int_0^\infty \mathrm{e}^{-E/k_BT}dE}\,. \tag{2.15}$$

Prosječna energija svakog stupnja slobode je dakle

$$\langle E\rangle_{\text{klasična}} = \int_0^\infty E\,P(E)\,dE = \frac{\int_0^\infty E\,\mathrm{e}^{-E/k_BT}dE}{\int_0^\infty \mathrm{e}^{-E/k_BT}dE}\,. \tag{2.16}$$

Uz pokratu $\beta = 1/k_BT$, gornji razlomak pišemo

$$\langle E\rangle_{\text{klasična}} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\beta E}\,dE\,) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(1/\beta\,) = \frac{1}{\beta} = k_BT\ \ , \tag{2.17}$$

pa račun preko definicija (2.15) i (2.16) očito reproducira rezultat (2.14) teorema o ekviparticiji energije u klasičnoj statističkoj fizici.

Porijeklo faktora k_BT u Rayleigh–Jeansovom zakonu (2.7) očito leži u prosječnoj energiji jednog stupnja slobode harmoničkog oscilatora u klasičnoj fizici.

Ovime želimo naglasiti da je proučavanje i izvođenje klasične gustoće zračenja na sve moguće načine pokazalo da je Rayleigh–Jeansov zakon (2.7) točan, općenit i **neizbježan rezultat klasične fizike**, a ne plod neke greške ili nekih posebnih pretpostavki koje bi ga ograničile na neku specijalnu situaciju. To je važno naglasiti, jer je on baš zato i **katastrofalan** za klasičnu fiziku, premda se slaže s eksperimentalnim podacima bar za niske frekvencije i premda je oblika (2.5) kakav traži općeniti Wienov zakon. Iako naravno jako važno, pritom nije najkatastrofalnije to što se formula (2.7) ne slaže s eksperimentalnim podacima za visoke frekvencije, nego je najvažnije *kakvo* je to neslaganje. Dakle, najvažnije je to što je očigledno apsurdno da na *svakoj* temperaturi $T > 0$, spektralna gustoća energije zračenja monotono raste s frekvencijom do u beskonačnost kao ν^2. To znači da bi šupljina na konačnoj temperaturi T sadržavala po jedinici volumena energiju zračenja U_T beskonačnog iznosa. Kad bismo takvu šupljinu – recimo ugašenu pećnicu na sobnoj temperaturi – otvorili, iz nje bi prema Rayleigh–Jeansovu zakonu (2.7) trebalo da sine ne samo dugovalna i infracrvena, nego i vidljiva svjetlost, te još puno više ultraljubičastog (i još daleko više X- i γ-) zračenja. Ta besmislena predikcija naziva se *ultraljubičasta katastrofa*, a budući da je u klasičnoj fizici neizbježna, znači da je klasična fizika nesposobna opisati zračenje crnog tijela. Greška nije dakle u izvodu formule (2.7), već u pretpostavci da se na zračenje crnog tijela mogu primijeniti zakoni klasične fizike.

Gdje je rješenje? Interesantno je da je već James Jeans – inače znanstvenik koji je u kinetičkoj teoriji plinova dokazao zakon ekviparticije energije – bio na pravom tragu, ali naravno ne kod zračenja crnog tijela, već u jednom drugom, samo naizgled potpuno drugačijem problemu. Taj problem je onaj spomenut na samom početku ovog poglavlja – naime, toplinski kapaciteti plinova koji su uznemiravali Maxwella: zaista, problem je da oni nikako ne mogu biti konzistentni s kinetičkom teorijom plinova ako vijedi zakon ekviparticije energije, da na temperaturi T svaki nezavisni vibracioni stupanj

slobode sustava ima prosječnu energiju $\langle E\rangle = k_B T$ (jer harmonički oscilator ima prosječnu kinetičku energiju $\frac{1}{2}k_B T$ i prosječnu potencijalnu energiju $\frac{1}{2}k_B T$). Jeans je uočio da bi problem bio riješen kad bi se visokofrekventne vibracije molekula plina s padom temperature "zamrzavale", t.j. otpadale kao relevantni stupnjevi slobode jer ih se na preniskoj temperaturi ne bi moglo pobuditi.

Kod "ultraljubičaste katastrofe", zbog same prirode tog problema, očito je još plauzibilnije nego kod toplinskih kapaciteta plinova, da problem nastaje zbog precjenjivanja doprinosa visokofrekventnih oscilacija, koje vjerojatno zapravo uopće *ne mogu* biti pobuđene ako je temperatura preniska, i zato *nemaju* energiju $k_B T$. Ali gdje pronaći, kako dobiti nekakav mehanizam za gušenje doprinosa visokih frekvencija? U klasičnoj fizici ga nije bilo – u stvari, na temelju njenih zakona pojavljivalo se baš suprotno: ekviparticija energije $\langle E\rangle = k_B T$.

Doduše, u Wienovom specijalnijem zakonu (2.6) takvo gušenje je prisutno. Međutim, Wien je pri izvodu te spektralne gustoće (2.6) takvo gušenje implicite *sam unio* ("rukom", u fizičarskom žargonu) pomoću svojih pretpostavki o mehanizmu zračenja.

Wien je pretpostavio da to zračenje potječe od molekula za čije iznose brzinâ v vrijedi Maxwell-Boltzmannova raspodjela vjerojatnosti,

$$P_{\mathrm{Mxwl-Bltzmn}}(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} v^2 \mathrm{e}^{-\frac{mv^2}{2k_B T}}\,, \tag{2.18}$$

jer je uočio sličnost te trnuće krivulje s eksperimentalnom spektralnom raspodjelom zračenja crnog tijela. Također je pretpostavio da te molekule u interval frekvencija $[\nu, \nu + d\nu]$ mogu zračiti samo ako su im brzine u intervalu $[v, v + dv]$, te da je intenzitet zračenja proporcionalan broju molekula koje zrače. Time se očito u spektralnu raspodjelu po frekvencijama ili valnim duljinama mora prenijeti eksponencijalno prigušenje koje je u Maxwellovoj raspodjeli prisutno za brzine. Međutim, iako na pravom tragu jer je pokušavao dobiti potrebno gušenje visokih frekvencija, Wien tim svojim pretpostavkama očito nije uspio "napipati" neki fizikalni zakon od fundamentalnog značaja, jer spektralna raspodjela (2.6) koja iz njih slijedi nije dobra na nižim frekvencijama (a ni na srednjim, onima oko $\nu_{max} = c/\lambda_{max}$).

U toj je situaciji Planck najprije fenomenološki našao funkcijski oblik (2.34) za spektralnu raspodjelu $u_T(\nu)$ koji je opisivao ("fitao") eksperimentalne rezultate za sve frekvencije zračenja crnog tijela, te se u granici visokih frekvencija reducirao na specijalni (2.6) Wienov zakon, a u granici niskih, $\nu \to 0$, na Rayleigh-Jeansovo (2.7) ponašanje $\propto \nu^2$. Međutim, pitanje je bilo kako tu (isprva čisto fenomenološku) formulu (2.34) izvesti, kako ju teorijski objasniti.

2.3 Planckova kvantna hipoteza i njeni rezultati

Pravu prosječnu vrijednost energije harmoničkog oscilatora, koja će zamijeniti klasični rezultat $\langle E \rangle = k_B T$ u Rayleigh–Jeansovoj formuli, može se dobiti preko onog što je pretpostavio Planck, a što se vremenom pokazalo u najdubljem smislu riječi fundamentalnim zakonom prirode, iako u suprotnosti s klasičnom fizikom. Planck je razdijelio ukupnu energiju E oscilatora crnog tijela u konačne "elemente energije", ϵ, postupkom nazvanim "kvantizacija". Tako je počelo otkrivanje *kvantne fizike*. U svom radu [2] predstavljenom Njemačkom fizikalnom društvu na zasijedanju 14. prosinca 1900, Planck smatra energiju "... E sačinjenom od potpuno određenog broja konačnih jednakih dijelova, i za to se služimo konstantom prirode $h = 6,55 \times 10^{-27}\text{erg} \cdot \text{s}$. Ta konstanta pomnožena zajedničkom frekvencijom rezonatora, ν, daje element energije ϵ u ergima, a dijeleći E s ϵ dobivamo broj P elemenata energije raspodijeljenih na N rezonatora."

Planck je naime uvidio* da eksperimentalne gustoće energije zračenja može teorijski reproducirati samo ako pretpostavi nešto, sa stanovišta dotad poznate fizike vrlo neobično – naime, da harmonički oscilator prirodne frekvencije ν može emitirati i apsorbirati energiju samo u diskretnim porcijama, u kvantima energije $\epsilon_\nu = h\nu$. Time je postigao i postepeno nastupanje potrebnog

*Povijesno, Planck je najprije do kvantizacije došao proučavanjem *entropije* oscilatora u crnom tijelu. Međutim, ovdje nećemo dalje slijediti povijesni razvoj, jer nam nije potrebno ulaziti u pručavanje entropije. Također, u ovom slučaju je povijesni razvoj slabo koreliran s pojmovno-logičkim sazrijevanjem kvantne teorije, među ostalim i zato što je Planck, kojem je odstupanje od klasičnih ideja samom bilo vrlo nelagodno, godinama nastojao naći načina da svoju hipotezu učini što manje radikalnom kako bi odstupanje od klasične teorije bilo što manje (kao što smo istakli u uvodnom poglavlju). Zato ovdje izlažemo pojmovno-logički razbistrenu verziju.

prigušenja na frekvencijama višim od $\epsilon_\nu = h\nu \sim k_B T$. Naime, prosječna energija nasumičnog toplinskog gibanja je $k_B T$, pa ako energiju možemo emitirati samo u "porcijama" $h\nu$, vrlo je mala vjerojatnost da nasumična termalna pobuđenja na temperaturi T imaju energiju i dovedu do emisije kvanta energije $\epsilon_\nu \equiv h\nu >> k_B T$.

Nova fundamentalna konstanta h je kasnije prozvana *Planckovom konstantom*. Po Planckovoj kvantnoj hipotezi, energija zračenja frekvencije ν može postojati samo u cjelobrojnim multiplima od $\epsilon_\nu = h\nu$. Isto tako, to znači da harmonički oscilator frekvencije ν ne može imati bilo kakvu energiju, već samo energije na diskretnim nivoima razmaknutim za taj elementarni inkrement energije $h\nu$. To očito znači negiranje dotad poznatih, klasičnih zakona fizike, jer je u oštroj suprotnosti s onim što vrijedi za klasični harmonički oscilator. Takav oscilator mase m i prirodne frekvencije ν (odnosno $\omega \equiv 2\pi\,\nu$) ima energiju

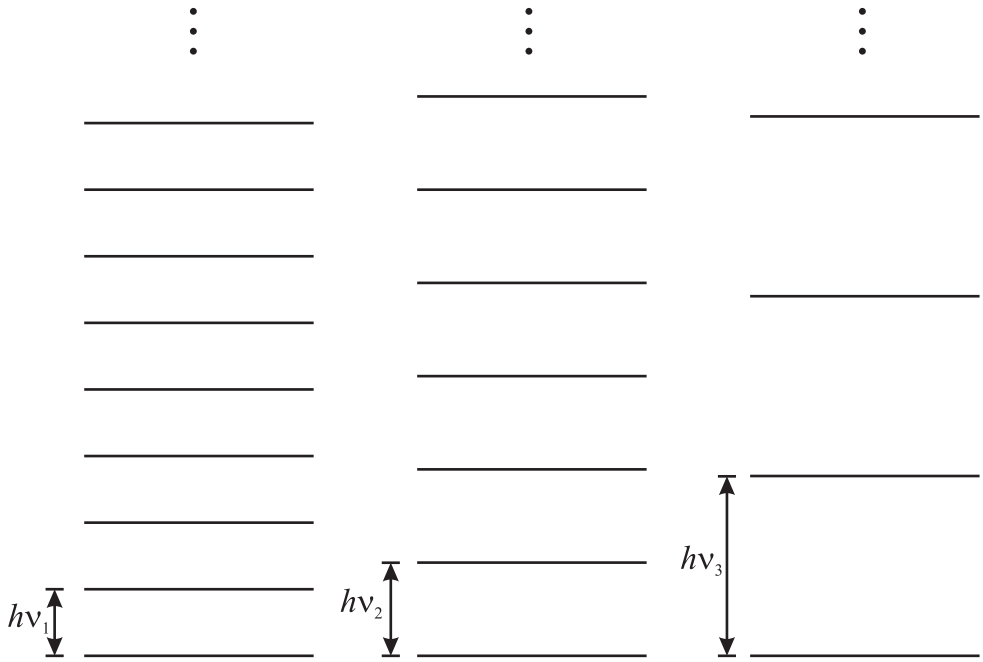
$$E_{\rm klas} \;=\; \frac{1}{2}\,m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 \,+\, m\,\frac{4\pi^2\nu^2}{2}\,x^2 \;=\; m\,\frac{4\pi^2\nu^2}{2}\,x_{\rm max}^2 \;\equiv\; m\,\frac{\omega^2}{2}\,x_{\rm max}^2 \quad (2.19)$$

koja očito može biti bilo kakva, jer je izražena kontinuiranim veličinama kakva je maksimalna elongacija $x_{\rm max}$ i sama staza (putanja, trajektorija, orbita) $x(t)$ (2.8) u svakom času t. Prema Planckovoj hipotezi to nije točno, odnosno može biti točno samo u ograničenom smislu, u limesu $h \to 0$, tj. u situacijama kada je veličina Planckove konstante zanemariva relativno prema drugim relevantnim veličinama. Tada bi i diskretne dozvoljene energije Planckovog kvantnog harmoničkog oscilatora, razmaknute za kvant energije $\epsilon_\nu = h\nu$, ponovo prešle u kontinuum. Međutim, problem zračenja crnog tijela očito ne spada u takve situacije (osim za razmjerno niske frekvencije), i upravo je Planckova kvantna hipoteza donijela njegovo rješenje koje ćemo sad izložiti.

Pretpostavimo da su moguće energije harmoničkog oscilatora diskretne i razmaknute ekvidistantno. Osnovno stanje (tzv. "vakuumsko stanje") ima najnižu energiju E_0, a beskonačno visoka ljestvica pobuđenih stanja neka ima energije $E_1 = E_0 + h\nu$, $E_2 = E_1 + h\nu = E_0 + 2h\nu$, $E_3 = E_2 + h\nu = E_0 + 3h\nu$, $E_4 = E_3 + h\nu = E_0 + 4h\nu$, ..., itd., kao na Slici 2.4. Općenito,

$$E_n = E_0 + n\,h\nu \;. \quad (2.20)$$

Ovakav spektar energija, prikazan za tri razne frekvencije ν na Slici 2.4, pokazao se neophodan za izvod empirički uspješne formule zračenja crnog tijela.



Slika 2.4: Diskretni ekvidistantni spektri tri kvantna harmonička oscilatora s prirodnim frekvencijama ν_1, ν_2 i ν_3.

Četvrt stoljeća nakon toga dobiven je i direktno, rješavanjem Schrödingerove jednadžbe za harmonički oscilator.

Planck je nadalje pretpostavio da je vjerojatnost zauzeća pojedine energijske razine data Boltzmannovom raspodjelom (2.15). Prema tome, ako P_0 označava vjerojatnost da je neki oscilator u osnovnom stanju, $P_0 \equiv P(E_0)$, vjerojatnost da je oscilator u *dozvoljenom* višem, n-tom stanju, iznosi

$$P_n = P_0\, \mathrm{e}^{-(E_n - E_0)/k_B T} = P_0\, \mathrm{e}^{-nh\nu/k_B T}\ . \tag{2.21}$$

Primijetimo da smo Boltzmannovu raspodjelu vjerojatnosti pretpostavili i kod izvoda (2.15)-(2.17) klasične prosječne energije (2.14), samo što smo tamo imali kontinuirane energije E, a ne diskretnu ljestvicu energija. Zato smo u tom izvodu integrirali, dakle sumirali po kontinuiranim energijama. Račun prosječne energije koji slijedi zapravo je analogan izvodu (2.15)-(2.17), samo što ćemo sada umjesto integrala po energijama imati diskretne sume preko ljestvice mogućih energija koje su odvojene konačnim razmakom $h\nu$.

Ako je N_0 broj oscilatorâ (po jedinici volumena) u osnovnom stanju, onda ih u prvom pobuđenom stanju, dakle s energijom E_1, po pretpostavci (2.21) ima

$$N_1 = N_0 \exp(-h\nu/k_B T) = N_0\, x\ , \tag{2.22}$$

u drugom

$$N_2 = N_0 \exp(-2h\nu/k_B T) = N_0\, x^2\ , \tag{2.23}$$

itd. Općenito, u n-tom stanju, na energiji E_n, ima ih

$$N_n = N_0 \exp(-nh\nu/k_B T) = N_0\, x^n\ , \tag{2.24}$$

gdje smo uveli pokratu $x \equiv \exp(-h\nu/k_B T)$. Ukupni broj kvantnih oscilatorâ prirodne frekvencije ν je tada

$$\begin{aligned} N_{ukupni} &= N_0 + N_1 + N_2 + N_3 + ... + N_n + ... && (2.25)\\ &= N_0\,(1 + x + x^2 + x^3 + ... + x^n + ...)\,. && (2.26) \end{aligned}$$

Primjenom formule za sumu konvergentnog geometrijskog reda, to postaje

$$N_{ukupni} = N_0\, \frac{1}{1-x} \;=\; \frac{N_0}{1 - \mathrm{e}^{-h\nu/k_B T}}\ . \tag{2.27}$$

Ukupna energija tih oscilatorâ je

$$\begin{aligned} E_{ukupna} &= E_0N_0 + E_1N_1 + E_2N_2 + E_3N_3 + ... + E_nN_n + ... \\ &= E_0N_0 + (E_0 + h\nu)\, N_0\, x + (E_0 + 2h\nu)\, N_0\, x^2 + \\ &+ (E_0 + 3h\nu)\, N_0\, x^3 + ... + (E_0 + nh\nu)\, N_0\, x^n + ... \,. \end{aligned} \tag{2.28}$$

Separirajmo članove koji sadrže E_0 kako bismo odvojili doprinos energije najnižeg, osnovnog stanja ($n = 0$) od energije pobuđenja:

$$\begin{aligned} E_{ukupna} &= E_0N_0\,(1 + x + x^2 + x^3 + ... + x^n + ...) \\ &\quad + h\nu\, N_0\,(x + 2x^2 + 3x^3 + ... + nx^n + ...) \\ &= E_0\,\frac{N_0}{1-x} + h\nu\, N_0\, x\,(1 + 2x + 3x^2 + ... + nx^{n-1} + ...)\,. \end{aligned} \tag{2.29}$$

Prvi član je očito E_0N_{ukupni}, t.j. ukupan doprinos *svih* oscilatora uslijed energije osnovnog stanja E_0. Ostatak je doprinos koji postoji jer su neki oscilatori pobuđeni i imaju energiju za $nh\nu$ ($n = 1, 2, 3, ...$) *višu* od E_0.

Geometrijski red u zagradi u zadnjem članu prethodne formule pišemo kao derivaciju reda u (2.26):

$$\frac{d}{dx}(1 + x + x^2 + x^3 + ... + x^n + ...) \;=\; \frac{d}{dx}\,\frac{1}{1-x} = \frac{1}{(1-x)^2}\;, \tag{2.30}$$

pa je ukupna energija oscilatorâ prirodne frekvencije ν

$$E_{ukupna} = E_0\, N_{ukupni} \;+\; \frac{h\nu\, N_0\, x}{(1-x)^2} = E_0\, N_{ukupni} \;+\; N_{ukupni}\,\frac{h\nu\, x}{1-x}\,. \tag{2.31}$$

Po definiciji prosječne energije $\langle E\rangle$,

$$\langle E\rangle \equiv \frac{E_{ukupna}}{N_{ukupni}} = E_0 \;+\; h\nu\,\frac{x}{1-x} \;=\; E_0 \;+\; \frac{h\nu}{\mathrm{e}^{h\nu/k_BT} - 1}. \tag{2.32}$$

Klasično, najniža energija oscilatora $E_0 = 0$, i odgovara oscilatoru u stanju mirovanja u položaju ravnoteže, tako da i kinetička i potencijalna energija iščezavaju. U kontekstu elektromagnetizma ta situacija odgovara jednostavno vakuumu u kojem nema nikakvih elektromagnetskih poljâ, pa ni oscilirajućih. Pitanje je smijemo li ovdje preuzeti klasični rezultat $E_0 = 0$.

Kasnija kvantnomehanička razmatranja, poput rešavanja Schrödingerove jednadžbe za harmonički oscilator frekvencije ν, pokazala su da zapravo $E_0 = h\nu/2 \neq 0$, te da to za mnoga fizikalna pitanja ima značaja. Da je tako, vidimo i ovdje u Zadatku 2.6, koji pokazuje da mora biti $E_0 = h\nu/2$ da bi kvantna prosječna energija (2.32) u klasičnom limesu $h\nu/k_BT \to 0$ reproducirala klasičnu prosječnu energiju harmoničkog oscilatora k_BT (2.14). (To je prva pojava [3] tzv. "energije nultog gibanja", odnosno energije vakuuma, koja ne iščezava na $T = 0$.)

Međutim, za rješavanje problema zračenja crnog tijela, možemo mirno preuzeti pretpostavku da energija nepobuđenog oscilatora iščezava, $E_0 = 0$, kao i u klasičnom slučaju. Naime, gornji izvod pokazuje da $E_0 \neq 0$ prosječnoj energiji oscilatora pridonosi samo *temperaturno neovisan* član. On je isti za svaku točku svemira i ima značenje energije vakuuma, pa je irelevantan za gustoću zračenja crnog tijela na temperaturi T. Drugim riječima, ovdje su važne samo razlike energija između mogućih nivoa, jer svaka konkretna vrijednost E_0 u ovom problemu ima samo značenje izbora referentnog ishodišta od kojeg računamo energiju. Budući da nas zanima zračenje koje postoji zbog zagrijavanja na neku temperaturu $\mathtt{T}$, možemo uzeti $E_0 = 0$, čime eliminiramo temperaturno neovisan doprinos vakuuma. Alternativno, možemo držati $E_0 \neq 0$ ako uočimo da iz gornje diskusije slijedi da klasičnu prosječnu energiju (2.14), $\langle E\rangle_{\text{klasična}} = k_B\mathrm{T}$, moramo zamijeniti kvantnom predikcijom za prosječnu energiju *pobuđenja* na temperaturi T, naime prosječnom energijom iz koje je oduzeta energija osnovnog stanja: $\langle E\rangle - E_0$.

Naš rezultat (2.32) dakle znači da je za harmonički oscilator prirodne frekvencije ν, kvantna predikcija za prosječnu energiju pobuđenja

$$\langle E\rangle - E_0 \;=\; \frac{h\nu}{\mathrm{e}^{h\nu/k_{\mathrm{B}}\mathtt{T}} - 1} \;\equiv\; h\nu\,\rho_{\mathtt{T}}(\nu) \tag{2.33}$$

i to je ono što u izvodu frekventne distribucije $u_T(\nu)$ zamjenjuje klasičnu predikciju $k_{\mathrm{B}}\mathtt{T}$ za svaku vrijednost $h\nu/k_{\mathrm{B}}\mathtt{T}$. Međutim, kvantni se rezultat (2.33) približava toj klasičnoj predikciji (2.14) za $h\nu << k_BT$; naravno, to točnije što je elementarni kvant energije $h\nu$ manji od tipične energije toplinskog gibanja k_BT. Formula (2.33), a i (2.32) uz $E_0 = 0$, egzaktno reproducira klasični rezultat (2.14) [koji pak vodi na Rayleigh-Jeansov zakon (2.7)] u limesu $h \to 0$; dakle, u klasičnom limesu iščezavajuće malog kvanta energije, $h\nu \to 0$, odnosno kontinuiranih energija harmoničkog oscilatora.

Tada je dovoljno eksponencijalu u nazivniku (2.33) razviti do prvog reda u $h\nu$, da bi (2.33) poprimila klasičnu vrijednost k_BT. Ako eksponencijalu u (2.33) ili (2.32) razvijemo do drugog reda u $h\nu/k_BT$, možemo uzeti nešto blažu pretpostavku, da je pojedini kvant energije $h\nu \neq 0$ zanemariv *u usporedbi* s toplinskom energijom k_BT. To jest, da je klasični limes dat sa $h\nu/k_BT \to 0$, pa se postiže bilo niskom frevencijom $\nu \to 0$, bilo visokom temperaturom $T \to \infty$. Tada i formula (2.33) i formula (2.32) egzaktno reproduciraju klasični rezultat (2.14) pod uvjetom da $E_0 = h\nu/2$. (Zadatak 2.6.)

Inače, (2.33) je prva formula kvantne fizike izvedena iz Planckove pretpostavke diskretnih energija harmoničkog oscilatora (2.20). Kada dakle u Rayleigh-Jeansovom zakonu (2.7) umjesto k_BT upotrijebimo (2.33), dobivamo Planckov zakon zračenja

$$u_T(\nu) \,=\, \mathcal{M}(\nu)(\langle E\rangle - E_0) \,=\, \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\,\frac{1}{\mathrm{e}^{h\nu/k_BT}-1}\,. \tag{2.34}$$

Ovaj se zakon slaže s eksperimentalnim gustoćama zračenja crnog tijela za sve frekvencije i temperature za Planckovu konstantu iznosa

$$h \,=\, 6,62607015\times 10^{-27}\ \mathrm{erg}\cdot\mathrm{s} \,=\, 6,62607015\times 10^{-34}\ \mathrm{J}\cdot\mathrm{s}\,. \tag{2.35}$$

To je vrijednost dobivena nakon raznovrsnih vrlo točnih mjerenja, nakon čega je odabrana da uđe među one vrijednosti prirodnih konstanti (kao i c, e, k_B i N_A) koje su definirane kao *egzaktne*, pa se iz njih izvode vrijednosti mjernih jedinica. Zamijetite da je vrijednost (2.35) samo oko 1% veća od one koju je objavio Planck već 1900. Tako je – prilagođujući Planckovu teorijsku krivulju eksperimentalnim spektralnim gustoćama energije zračenja crnog tijela – po prvi put izmjerena ova fundamentalna konstanta prirode.

2.4 Inspiracija za Einsteinove čestice svjetla

Kao i Planck, Einstein je početkom 1905. problemu zračenja crnog tijela pristupio preko statističke fizike i termodinamike. Nije bio zadovoljan (kao uostalom ni sam Planck) nekim aspektima Planckovog izvoda koji se oslanjao na harmoničke oscilacije naboja u materijalu zidova šupljine. Einstein je dao

prednost pristupu preko harmoničkih oscilacija stojnih elektromagnetskih valova. Naravno, uz upotrebu klasične ekviparticije energije k_BT po svakom nezavisnom modu harmoničkog titranja, to vodi do Rayleigh-Jeansove formule i ultraljubičaste katastrofe na visokim frekvencijama. A tu se s eksperimentalnim rezultatima slaže ne samo Planckova formula (2.34), nego i Wienova (2.6), koja je plod nekih modelskih pretpostavki. To joj kvari općenitost, no budući da se na visokim frekvencijama tako dobro slaže i sa svuda uspješnim Planckovim zakonom i s eksperimentalnim podacima, to može biti znak da Wienove modelske pretpostavke imaju veze s ispravnom vizualizacijom fizikalne situacije bar na visokim frekvencijama, gdje je energija Planckovog kvanta $\epsilon_\nu \equiv h\nu$ znatno veća od prosječne energije nasumičnog, toplinskog gibanja k_BT.

U tom režimu, gdje $\epsilon_\nu \equiv h\nu >> k_BT$, Planckova formula daje Wienovu, i to naravno na način da potpuno određuje (predviđa) konstante K_1 i K_2 u Wienovom specijalnijem zakonu (2.6):

$$u_T^{(\mathrm{Pl}\to\mathrm{W})}(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\,\mathrm{e}^{-h\nu/k_BT} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\,h\nu\,\mathrm{e}^{-h\nu/k_BT} \equiv \mathcal{M}(\nu)\epsilon_\nu\,\mathrm{e}^{-\epsilon_\nu/k_BT}. \tag{2.36}$$

Međutim, Wien je u svom specijalnijem zakonu (2.6) gušenje doprinosa na visokim frekvencijama modelirao pomoću pretpostavki o mehanizmu zračenja. (Tu je Wien bio pod utjecajem radova fizičara iz carske Rusije, W. A. Michelsona, u Phil. Mag. **5**, 425 (1888) i Wied. Ann. **58**, 662 (1896). Michelsonove ideje zaslužuju spomen unatoč netočnostima koje sadrže, jer je on izgleda bio prvi koji je zračenje povezao s česticama kojima je energija povezana s frekvencijom, pa je njegov rad vjerojatno utjecao i na Einsteinovo objašnjenje foto-efekta. Doduše, Michelson pretpostavlja $\nu \propto v$, pa mu je kinetička energija $mv^2/2 \propto \nu^2$.)

Wien je pretpostavio da to zračenje potječe od molekula ili atoma idealnog plina; dakle, od slobodnih čestica za čije brzine vrijedi Maxwell-Boltzmannova raspodjela vjerojatnosti po iznosima brzinâ v,

$$P_{\mathrm{Mxwl-Bltzmn}}(v) \;=\; \left[4\pi\left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{\frac{3}{2}} v^2\right]\,\mathrm{e}^{-\frac{mv^2}{2k_BT}}\,. \tag{2.37}$$

Nadalje je pretpostavio da te čestice plina u interval frekvencija $[\nu, \nu + d\nu]$ mogu zračiti samo ako su im brzine u intervalu $[v, v + dv]$, te da je inten-

zitet zračenja proporcionalan broju molekula koje zrače. Time se očito u spektralnu raspodjelu po frekvencijama ili valnim duljinama prenosi eksponencijalno prigušenje koje je u Maxwell-Boltzmanovoj raspodjeli prisutno za (kvadrat) brzine, tj. energije $E_{\rm kin} = mv^2/2$ slobodnih česticâ plina. To pak znači raspodjelu gustoće energije u slobodnom plinu:

$$\mathcal{E} \;=\; E_{\rm kin} P_{\rm Mxwl-Bltzmn}(v^2 \propto E_{\rm kin}) \;=\; \left[4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} v^2 \right] E_{\rm kin}\, {\rm e}^{-\frac{E_{\rm kin}}{k_B T}} \,. \tag{2.38}$$

Iako su normalizacioni prefaktori trnuće eksponencijale različiti u (2.36) i (2.38) ipak je sličnost (2.36) i (2.38) vrlo sugestivna, pa se kod Einsteina počela rađati ideja o plinu kojeg sačinjavaju *čestice svjetla*. Te čestice svjetla, odnosno elektromagnetskog polja, su nosioci Planckovog kvanta energije $\epsilon_\nu \equiv h\nu$, i u modernoj fizici ih poznamo pod imenom fotoni odnosno kvanti elektromagnetskog polja. Njihovo pak mnoštvo nazivamo *fotonski plin*, a faktor $\rho_T(\nu)$ u jednadžbi (2.33), dakle

$$\rho_T(\nu) \;=\; \frac{1}{{\rm e}^{h\nu/k_B T} - 1} \;\equiv\; P_{\rm Bose\text{-}Eins}(E)\,, \qquad (\, E = h\nu \,)\,, \tag{2.39}$$

predstavlja novu, kvantnu statističku raspodjelu vjerojatnosti za fotone, nazvanu Bose-Einsteinova raspodjela. Ona je zapravo općenitija, jer se ustanovilo da vrijedi ne samo za fotone, nego za cijelu jednu vrstu kvantnih čestica koje nazivamo bozoni. Foton je samo daleko najčešći i najobičniji, te zato i najpoznatiji primjer bozona. (Osim bozona, postoje i tzv. fermioni, za koje vrijedi drugačija kvantna statistička raspodjela. Najobičniji primjeri su fermioni koji tvore atome naših tijelâ: elektron, te nukleoni – proton i neutron. No, sve dok nam nije potrebno preciziranje vrstâ takvih *objekata koji podliježu kvantnim zakonima* (iako mogu biti daleko veći i složeniji od gore navedenih elementarnih primjera), možemo ih sve zajedno nazivati kvantnim objektima ili kvantnim česticama, ili sažetije - *kvantonima* [21]. To je važno, da bismo uvijek imali na umu da imaju specifično kvantna svojstva i stoga drugačiju prirodu od klasičnih čestica.)

Naravno, ovi začeci kvalitativnih argumenata koje smo iznijeli u ovoj sekciji, dali su Einsteinu samo početni poticaj za traženje jačih argumenata za te čestice svjetla - kvante elektromagnetskog polja, fotone. U njih se konačno uvjerio kada je pokazao da se u frekventnom području $\epsilon_\nu \equiv h\nu >> k_B T$ gdje vrijedi specijalni Wienov zakon (2.6), entropija zračenja ne ponaša kao entropija valova, nego kao entropija čestica [4].

Ta Einsteinova analiza entropije izlazi iz okvira ovog kolegija, ali smo dovoljno rekli da možemo razumjeti kako revolucionarna ideja o postojanju kvanata elektromagnetskog polja, koja će se u sljedećem poglavlju pokazati od krucijalne važnosti za *potpuno* objašnjenje fotoelektričnog efekta, nije Einsteinu pala na pamet kao čisto intuitivna inspiracija, nego je proizašla iz njegovog temeljitog proučavanja i objašnjavanja zračenja crnog tijela [4].

2.5 Zadaci 2

2.1.) Spektralne gustoće zračenja koje su dane kao funkcije valne duljine izrazite kao funkcije frekvencije, i obratno. Time ćete dokazati formulu (2.2).

2.2.) Koje spektralne gustoće zračenja zadovoljavaju oblik (2.5) koji zahtijeva Wienov zakon iz 1893?

2.3.) Provjerite da Planckov zakon zračenja u odgovarajućim graničnim slučajevima ($h\nu << k_B T$ i $h\nu >> k_B T$) daje Rayleigh–Jeansov zakon, odnosno Wienov zakon (2.6) iz 1896. Odredite na taj način konstante K_1 i K_2 u Wienovim spektralnim gustoćama energije (2.6).

2.4.) Pokažite da Planckov zakon zračenja (2.34) preko formulâ (2.3) daje Stefanov zakon $\mathcal{S}_T = \sigma\, T^4$, te da predviđa da je Stefan–Boltzmannova konstanta $\sigma = 2\pi^5 k_B^4/15h^3c^2$. Izračunajte njenu (empirički provjerenu) vrijednost $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8}$ W/m^2 K^4.

Rješenje:

Uvršten u izraz (2.3) za izračenu snagu, Planckov zakon zračenja (2.34) uvođenjem pokrate $x \equiv h\nu/k_B T$ daje konstantu $2\pi k_B^4/h^3c^2$ koja množi sljedeći tablični integral poznate vrijednosti: $\int_0^\infty dx\, x^3\, (\mathrm{e}^x - 1)^{-1} = \pi^4/15$.

2.5.) Dokažite formulu (2.13) za broj modova elektromagnetskog polja. (Ne zaboravite da mu doprinose dvije polarizacije.)

Rješenje:

Iz teorije elektriciteta i magnetizma je poznato da na vodljivim zidovima moraju iščezavati one komponente $\mathbf{E}$ koje su paralelne sa zidovima. U prostoru bez naboja i njihovih struja, kao što je šupljina kojom realiziramo crno tijelo, električno polje $\mathbf{E}$ je dato vektorskim potencijalom preko $\mathbf{E} = -\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}$. Zato stojni val elektromagnetskog vektorskog potencijala $\mathbf{A}$ (2.12) mora zadovoljavati iste rubne uvjete kao i stojni val električnog polja $\mathbf{E}$. Dakle, i polju $\mathbf{A}$ na zidovima šupljine moraju u svakom času t iščezavati komponente paralelne sa zidovima:

$$A_y(x=0,t) = 0 = A_y(x=L,t)\ ,\ A_z(x=0,t) = 0 = A_z(x=L,t)\ , \quad (2.40)$$

gdje je L duljina pravokutne šupljine duž x osi. Poopćenje na val u tri dimenzije je najjednostavnije za simetričan slučaj kada su duljine duž osi y i z također L. Tada ostale rubne uvjete dobivamo iz (2.40) cikličkom zamjenom $x \to y \to z \to x$, a volumen šupljine je $V = L^3$.

Kao i kod razapete žice, stojni val (2.12) postoji samo kada prirodni broj n poloviničnih valnih duljina $\lambda/2$ upašemo u duljinu L. Dakle, moramo imati valne duljine λ odnosno valne brojeve $k = 2\pi/\lambda$ isključivo s vrijednostima

$$\lambda = \frac{2\,L}{n}\ , \qquad k = \frac{\pi}{L}\,n\ , \qquad (n = 1, 2, 3, 4, ...) \qquad (2.41)$$

da bismo zadovoljili rubne uvjete (2.40). (Da ti valni brojevi, $k = n\pi/L$, osiguravaju da stojni valovi poput (2.12) zadovoljavaju rubne uvjete (2.40) vidimo i direktno iz uvjeta $\sin(kL) = 0$. Vidi i (8.42) za sličan primjer valne funkcije vezanog masivnog kvantona.)

Za brojanje tih modova valne duljine nisu pogodne jer su s prirodnim brojevima u inverznom odnosu, ali odgovarajući valni brojevi k jesu, jer su proporcionalni prirodnim brojevima n.

Kako valni broj k možemo definirati za svaku od nezavisnih prostornih osi x, y, z koje razapinju prostor šupljine, uočavamo da time definiramo odgovarajuće komponente valnog vektora $\mathbf{k} = k_x\mathbf{e}_x + k_y\mathbf{e}_y + k_z\mathbf{e}_z \equiv (k_x, k_y, k_z)$. Svaki takav linearno nezavisan vektor $\mathbf{k}$ karakterizira linearno nezavisan vektorski potencijal $\mathbf{A}_\mathbf{k}(\mathbf{r}, t)$, koji može biti generalizacija bilo putujućih valova (2.11), bilo ovdje relevantnih stojnih valova (2.12). U svakom slučaju, poznata disperzijska relacija za elektromagnetske valove, tj. veza između njihove

frekvencije $\nu = \omega/2\pi$ i trodimenzionalnog valnog broja $k \equiv |\mathbf{k}|$,

$$k^2 \,=\, \mathbf{k}^2 \,=\, k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \,=\, \frac{\omega^2}{c^2} \,=\, \frac{4\pi^2\,\nu^2}{c^2}\ , \tag{2.42}$$

kaže da fiksna vrijednost frekvencije (kroz c), odnosno valnog broja, odgovara radijusu sfere (u $\mathbf{k}$-prostoru) na čijoj površini točke imaju koordinate (k_x, k_y, k_z). Međutim, njihove vrijednosti u slučaju stojnih modova više nisu kontinuirane; naime, zbog zadovoljavanja šupljinskih rubnih uvjeta (2.40) i njihovih cikličkih varijacija, samo su diskretne vrijednosti (2.41) moguće duž svake osi:

$$k_i \,=\, \frac{\pi}{L}\,n_i \qquad (n_i = 1, 2, 3, 4, ...), \quad i = x, y, z\ . \tag{2.43}$$

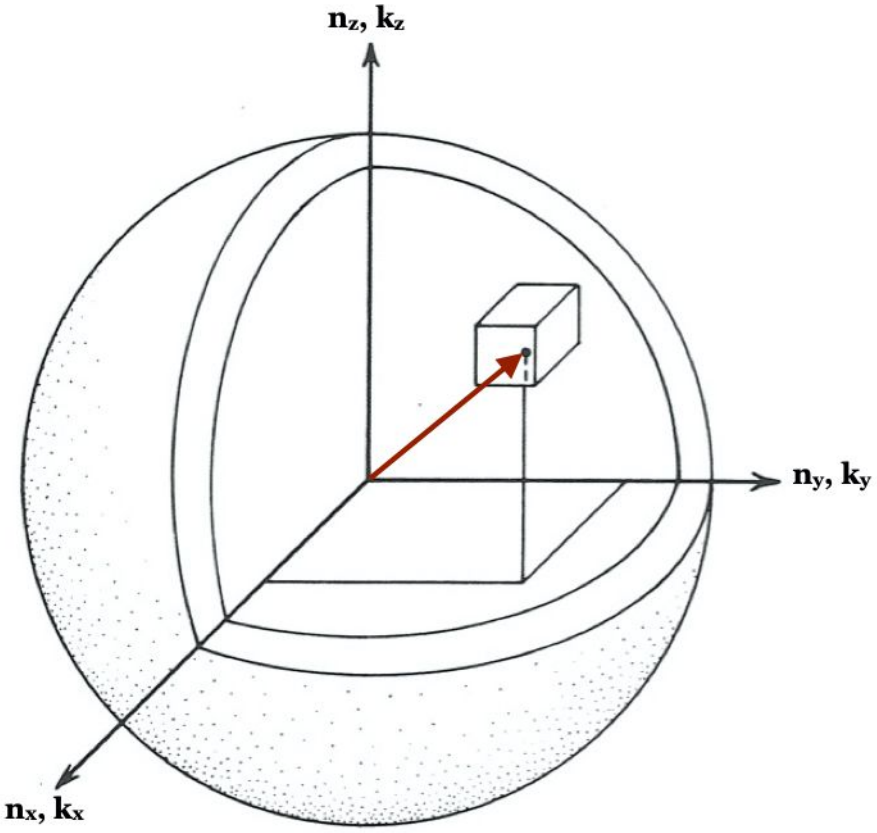
Dakle, svaki mogući nezavisni stojni mod EM polja $\mathbf{A}_\mathbf{k}(\mathbf{r}, t)$ u šupljini, odgovara točki u prostoru $\mathbf{k}$ koja je data trojkom prirodnih brojeva $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$, tj. vektorom rešetke u diskretnom trodimenzionalnom brojevnom prostoru. Prema tome, strelica na Slici 2.5 može predstavljati i $\mathbf{k}$ i $\mathbf{n}$, uz vezu

$$\mathbf{k} \,=\, (k_x, k_y, k_z) \,=\, \frac{\pi}{L}\,(n_x, n_y, n_z) \,=\, \frac{\pi}{L}\,\mathbf{n}\ . \tag{2.44}$$

Svakoj takvoj točki u $\mathbf{k}$-prostoru možemo pridružiti kockicu inkrementalnog $\mathbf{k}$-volumena $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = (\pi/L)^3 \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = (\pi/L)^3 = \pi^3/V$, koji odgovara svakoj pojedinoj ćeliji (jediničnog volumena, jer $\Delta n_i = 1$) rešetke u brojevnom prostoru. (V je uobičajeni, koordinatni volumen šupljine). Želimo vrlo malene inkremente koji prelaze u infinitezimalne diferencijale, $(\pi/L)^3 \,=\, \Delta k_x\,\Delta k_y\,\Delta k_z \,\to\, dk_x\,dk_y\,dk_z$, tako da te inkrementalne kockice glatko i potpuno ispunjavaju relevantan $\mathbf{k}$-prostor. Ovdje je to samo prvi oktant zbog $k_i > 0$ (odnosno $n_i \in \mathbb{N}$), $i = x, y, z$. Zato *osmina* volumena kugle radijusa $k = |\mathbf{k}|$ podijeljena s tim inkrementalnim volumenom kockice daje $\mathcal{N}(k)$, broj šupljinskih modova EM polja valnih brojeva od 0 do k,

$$\mathcal{N}(k) \,=\, \frac{1}{8}\,\frac{\frac{4\pi}{3}\,k^3}{(\frac{\pi}{L})^3} \times 2 \,=\, V\,\frac{k^3}{3\,\pi^2} \,=\, V\,\frac{\omega^3}{3\,\pi^2\,c^3} \,=\, V\,\frac{8\pi\,\nu^3}{3\,c^3} \,=\, \mathcal{N}(\nu)\ , \tag{2.45}$$

gdje smo još pomnožili faktorom 2 da uračunamo sve stupnjeve slobode, jer EM polje ima dvije nezavisne transverzalne polarizacije, okomite na $\mathbf{k}$. [Vidi na primjer $\mathbf{e}_{yz}$ u (2.12)]. Također smo u (2.45) upotrijebili vezu (2.42), te kao funkciju frekvencije izrazili broj nezavisnih vibracija od 0 do ν.



Slika 2.5: *Općeniti* valni vektor $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ ima proizvoljne komponente k_i. No, kad ih rubni uvjeti $\sin(k_i L) = 0$ ograniče na $k_i = (\pi/L)\, n_i$, uz $n_i \in \mathbb{N}$, svaki mogući stojni mod EM polja u šupljini odgovara točki u prostoru $\mathbf{k}$ koja odgovara trojci *prirodnih* brojeva, vektoru $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ u trodimenzionalnom brojevnom prostoru *nenegativnih* n_x, n_y i n_z. Dakle, samo prvi oktant prostora doprinosi. Zato *osmina* volumena kugle radijusa $k = |\mathbf{k}|$ podijeljenog s inkrementalnim volumenom kockice $(\pi/L)^3$ daje broj šupljinskih stojnih modova EM polja valnog broja iznosa $k = c\,\omega$. To jest, $\mathcal{N}(k) = \frac{1}{8}\frac{4\pi}{3}k^3/(\frac{\pi}{L})^3$, do na *dvije* nezavisne polarizacije elektromagnetskog polja.

Međutim, za raspodjele po frekvencijama poput onih u (2.1) (gdje je $u_T(\nu)\,d\nu$ iznos energije zračenja frekvencije ν unutar infinitezimalnog frekventnog intervala $d\nu$) treba nam diferencijalna promjena broja stanja $d\mathcal{N}(k) = d\mathcal{N}(\nu)$ radi diferencijalnog povećanja valnog broja $k \to k + dk$, ili ekvivalentno, povećanja frekvencije $\nu \to \nu + d\nu$. To jest, tražimo broj mogućih modova u sferičnoj ljusci (vidi Sliku 2.5) infinitezimalne debljine $dk = d\omega/c$. Ali, samo u režnju u prvom oktantu. Taj broj je volumen tog režnja (tj. njegova površina $4\pi\,k^2/8$ puta infinitezimalna debljina dk) podijeljen s inkrementalnim volumenom ćelije $(\pi/L)^3 = \pi^3/V$, puta 2 nezavisne polarizacije:

$$d\mathcal{N}(k) \;=\; \frac{4\pi\,k^2\,dk}{(\pi/L)^3} \times \frac{2}{8} \;=\; V\,\frac{k^2 dk}{\pi^2} \;=\; V\,\frac{8\pi\,\nu^2\,d\nu}{c^3} \;=\; d\mathcal{N}(\nu)\;. \qquad (2.46)$$

Najprije primijetimo da je smo taj rezultat mogli dobiti i diferenciranjem broja modova (2.45), pa je sve konzistentno.

Zatim uočimo da smo formulom (2.46) zapravo dovršili traženi dokaz formule (2.13). Naime, kako tražimo broj nezavisnih mogućih modova elektromagnetskog polja u šupljini kao funkciju frekvencije ν, ali *po jedinici volumena*, (2.46) pokazuje da

$$\mathcal{M}(\nu) \;\equiv\; \frac{1}{V}\,\frac{d\mathcal{N}(\nu)}{d\nu} \;=\; \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\,. \qquad (2.47)$$

daje gustoću mogućih stanja elektromagnetskog polja u šupljini.

2.6.) Pokažite da je za harmonički oscilator prirodne frekvencije $\nu \equiv \omega/(2\pi)$, kvantna predikcija za energiju osnovnog stanja (gdje $n = 0$), tj. za najnižu energiju, $E_0 = \frac{1}{2}\,h\nu \equiv \frac{1}{2}\,\hbar\omega$. (Vidi i riješeni Zadatak 9.11.) Time biste pokazali da spektar energija kvantnog harmoničkog oscilatora (2.20) glasi

$$E_n \;=\; h\nu\left(n + \frac{1}{2}\right) \;=\; \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\;, \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots\,. \qquad (2.48)$$

Rješenje:
Zahtijevajte da kvantni rezultat za prosječnu energiju (2.32) u klasičnom limesu $h\nu/k_BT \to 0$ reproducira klasičnu prosječnu energiju harmoničkog oscilatora k_BT (2.14). Eksponencijalnu funkciju u (2.32) morate razviti u Taylorov red do potencije $(h\nu/k_BT)^2$.

2.7.) Pokažite da Planckov zakon zračenja, kao i Wienov zakon (2.6), daju Wienov zakon pomaka (2.4), ali sa ponešto različitim konstantama. Nađite te konstante. Precizno, ako s $\nu_{\max}$ označimo frekvenciju na kojoj raspodjela ima maksimum, pokažite da u slučaju Wienove raspodjele $h\nu_{\max} = 3\,k_B T$, a slučaju Planckove, $h\nu_{\max} = 2.821\,k_B T$.

Rješenje: Zahtjevajte da derivacije odgovarajućih spektralnih distribucija po ν iščezavaju za $\nu = \nu_{\max}$, te riješite dobivene jednadžbe. U slučaju Planckove distribucije, tako dobivenu jednadžbu treba riješiti numerički.

2.8.) Sažmite izvod formula (2.32), (2.33) i (2.34) tako što ćete integrale po kontinuiranim energijama E u definiciji (2.16) zamijeniti diskretnim sumama po $E_n = E_0 + n\,h\nu, \quad n = 0, 1, 2, 3, ..., \infty$, te izvrijedniti te sume.

Poglavlje 3

Fotoelektrični efekt i hipoteza o kvantima svjetlosti

3.1 Ideja da kvante energije nose kvanti elektromagnetskog polja

U raspravama o tome, koji je od Einsteinovih pet fundamentalnih radova [6, 7, 8, 9, 10] iz "čudesne godine" 1905. značajniji, većina bi se fizičara, bez obzira na svoje glavno područije interesa, vjerojatno složila s ocjenom Franka Wilczeka, Nobelovca za 2004. godinu. On smatra [22] da Einsteinov rad o Brownovom gibanju [8] zaslužuje solidnu, rad o kvantima svjetlosti [6] jaku, a rad o specijalnoj relativnosti [9] i ekvivalenciji mase i energije [10] super-jaku Nobelovu nagradu.

No, ako se razmatra koji je od tih radova bio revolucionarniji, poredak bi bio drugačiji. Što je naime to, što neki znanstveni rad čini revolucionarnim? Jasno je da on mora iznijeti neku originalnu veliku ideju, koja mora izdržati test vremena i postati osnova ili važan dio širokih područija znanosti. Međutim, za revolucionarnost je potrebno [23] i to, da se ta velika ideja ne samo protivi prihvaćenim idejama tog vremena, nego i da je odbacuju čak i vrhunski znanstvenici sve dok je nisu apsolutno prisiljeni prihvatiti. U tom smislu, kod teorije relativnosti osobito valja imati na umu [24] doprinose H.

Poincaréa i H. A. Lorentza, još prije Einsteinove 1905. Osim toga, teorija je relativnosti, osim upornih protivnika, relativno brzo stekla i velik broj pristaša. Nasuprot tome, čak su i fizičari kao Max Planck i Niels Bohr, iako su i sami bili revolucionari kvantne teorije, uporno odbacivali Einsteinove kvante svjetlosti. To je bilo prvenstveno zbog njihove vjernosti konceptu klasičnih elektromagnetskih valova, premda je Einstein obrazložio da "se valna teorija svjetlosti sjajno pokazala pri opisima čisto optičkih fenomena" ali da "se optička opažanja odnose na vremenske prosjeke a ne na trenutne vrijednosti". (Ovog se moramo prisjetiti dolje, kod formula (3.3) i (3.4).) Zato je Einstein smatrao da može pretpostaviti da "kad se zraka svjetla širi iz neke točke, energija nije kontinuirano raspodijeljena po sve većem prostoru, nego se sastoji od konačnog broja kvanata energije koji su lokalizirani u točkama prostora, gibaju se bez dijeljenja, te mogu biti apsorbirani i generirani samo kao cjelina" [6]. On je tako u svom prvom radu iz 1905. godine postavio hipotezu o kvantima elektromagnetskog polja – dakle, "česticama svjetlosti", koje je 1926. godine Gilbert Lewis nazvao fotonima.

Zanimljivo je da je taj najrevolucionarniji Einsteinov rad [6] postao poznat kao "rad o fotoelektričnom efektu", iako je naravno mnogo općenitiji, a autorova motivacija za fotonsku hipotezu teorijska, a ne empirička. Fotoelektrični efekt mu je bio tek jedna od ilustracija za empiričku uspješnost njegove hipoteze, a na koncu je svoju jedinu Nobelovu nagradu Einstein dobio (barem nominalno) za objašnjenje fotoelektričnog efekta.

To se dogodilo zato što je s akumuliranjem sve pouzdanijih eksperimentalnih rezultata postalo jasno da je upravo fotoelektrični efekt onaj empirički fenomen koji je najuvjerljivije objašnjen fotonskom hipotezom, i koji najbolje ilustrira njenu efikasnost. Zato ćemo se i mi ovdje vrlo detaljno pozabaviti tim efektom.

3.2 Kronologija i značenje fotoelektričnog efekta

Fotoelektričnim efektom, ili skraćeno foto-efektom, nazivamo izbijanje elektrona iz tijelâ (tipično, iz poliranih metalnih pločâ) na koja pada elektromagnetsko zračenje: vidljiva svjetlost, ultraljubičasto zračenje, itd. Taj efekt je nađen i proučavan prvenstveno u pokusima Heinricha R. Hertza (1887), Wil-

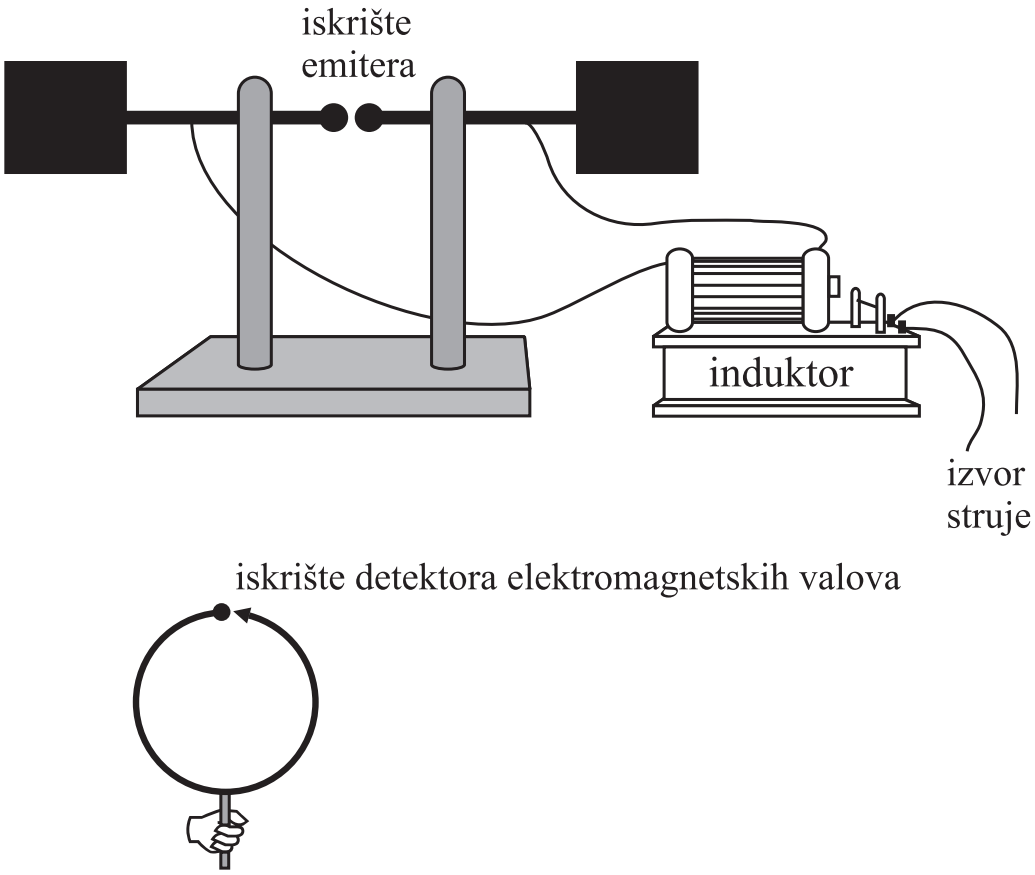
helma Hallwachsa (1888), Josepha J. Thomsona (1899), Philippa Lenarda (1899), te Roberta A. Millikana (1916). Osobita važnost foto-efekta je u tome što klasična fizika nije dovoljna da bi ga se objasnilo, već se mora primijeniti Planckova hipoteza o kvantima energije. Štoviše, čak se i ona mora radikalizirati proširenjem na Einsteinovu hipotezu o kvantima elektromagnetskog polja – dakle, "česticama svjetlosti".

Albert Einstein je dakle (1905. godine) otkrio da je foto-efekt prvi i vrhunski dokaz da svjetlost – i elektromagnetsko zračenje općenito – ima i čestičnu, a ne samo valnu prirodu. Hertzovo prvotno otkriće zato predstavlja poseban kuriozitet u povijesti znanosti. Naime, on je slučajno opazio foto-efekt baš prilikom onih slavnih pokusa, kojima je dokazao postojanje upravo elektromagnetskih valova.

3.3 Hertzovo otkriće foto-efekta

Prvi eksperimentalni odašiljač je Hertz sastavio od visokonaponskog induktora spojenog na dva mjedena cilindra (proširena velikim metalnim pločama da se poveća kapacitet prihvaćanja naboja) – vidi Sliku 3.1. Na krajevima cilindarâ bile su kuglice razmaknute za petinu milimetra. Time je načinio iskrište jer bi iskre preskakale zbog visokog napona iz induktora. Hertz je naime zamislio da će, čim iskra stvori vodljivu stazu između dva mjedena vodiča, električni naboj hitro oscilirati prelazeći naizmjence s jednog vodiča na drugi, te u skladu s Maxwellovom teorijom emitirati elektromagnetske valove valne duljine približne dimenzijama tih vodiča. No, da bi dokazao da su ti valovi zaista emitirani, morao ih je i detektirati. Hertzov detektor, dakle prvi prijemnik, bio je komad bakrene žice duljine približne (ukupnoj) duljini emiterskih vodiča, da bi prirodna (svojstvena) frekvencija oscilacije električne struje u toj žici bila bliska frekvenciji oscilacija u emiteru. Žicu s mjedenom kuglicom na jednom kraju i šiljkom na drugom kraju, Hertz je savio u krug, da bi se inducirane oscilacije naboja u žici razotkrile iskrenjem preko malenog razmaka između kuglice i šiljka (vidi Sliku 3.1). Zamisao je bila uspješna: čim bi se induktor stavio u pogon, u iskrištu "prijemnika" bi počele preskakati iskrice.

Razradom osnovne ideje u nizu brilijantnih eksperimenata, Hertz je nepo-

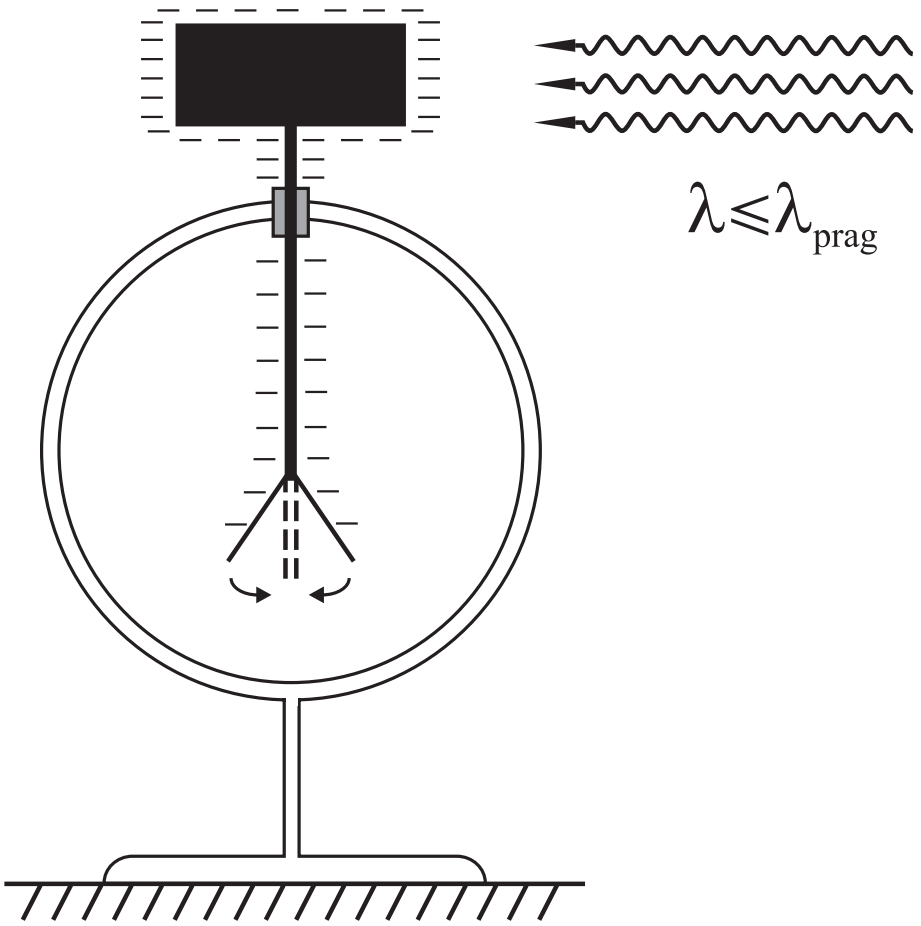


Slika 3.1: Prvi radio-odašiljač i prijemnik: Hertzov emiter i detektor elektromagnetskih valova. Pomoću njih je Hertz dokazao postojanje Maxwellovih valova, ali je istovremeno otkrio i fotoelektrični efekt. Naime, primjetio je da električna iskra lakše izbija na metalnom iskrištu detektora ako ga obasjava ultraljubičasta svjetlost.

bitno dokazao postojanje Maxwellovih elektromagnetskih valova. Ono što je pak dovelo do otkrića foto-efekta, bilo je Hertzovo nastojanje da poboljša detekciju time da bolje vidi iskrice. To je pokušavao postići zamračivanjem iskrišta detekora njegovim zatvaranjem u kutiju, ali je opazio da je time primjetno smanjena maksimalna duljina iskrica; odnosno, maksimalni razmak između kuglice i šiljka morao se znatno smanjiti da bi iskrice preskakale i sada. Dakle, zatvaranje u kutiju je otežalo iskrenje u odnosu na prethodnu situaciju. Uklanjanjem raznih dijelova kutije, vidjelo se da to otežanje uzrokuje samo onaj dio koji zaklanja iskrište detekora od iskara na emiteru, i to nezavisno od položaja te prepreke. Važno je bilo samo da li iskre emitera nesmetano obasjavaju iskrište detekora ili ne, pa je Hertz konačno zaključio da to obasjavanje na neki način olakšava iskrenje detekora. Upornim izvođenjem raznovrsnih pokusa pokazao je i da taj efekt ne izaziva vidljiva svjetlost, nego ultraljubičasta. Naime, zasjenjenje izvora izazivale su i sasvim prozirne ploče ako su bile od običnog stakla, a one od kvarcnog stakla nisu. Znalo se da zračenje iskara uz vidljivu svjetlost ima i ultraljubičastu komponentu. Nju kvarcno staklo propušta, ali obično staklo ne. Na koncu je Hertz kvarcnom prizmom rastavio svjetlost iskarâ odašiljača na komponentne valne duljine i dokazao da one ultraljubičaste, dakle kraće od vidljivih, na neki tajnoviti način olakšavaju i pojačavaju električne izboje, t.j. iskrenje detektora.

3.4 Daljnji eksperimentalni razvoj

Hertzovo slučajno otkriće foto-efekta zbilo se u kontekstu pokusa namijenjenog drugoj svrsi (emisiji i detekciji elektromagnetskih valova), gdje su okolnosti bile prekomplicirane a da bi se moglo doći do daljnjih spoznaja o čemu se tu radi. Zato je W. Hallwachs već sljedeće, 1888. godine načinio jednostavan pokus koji nam i danas služi kao školski primjer foto-efekta. Izoliranu pločicu cinka (kao u originalnom Hallwachsovom pokusu) ili nekog drugog metala spojimo na elektroskop koji može biti nabijen negativno ili pozitivno da bi mu listići bili razdvojeni. Ako pazimo da sve bude dobro izolirano, naboj će se gubiti vrlo sporo, t.j., dugo će vremena trebati da primijetimo i najmanje sklapanje listića elektroskopa. Zatim, metalnu pločicu obasjavamo svjetlom raznih intenziteta i valnih duljina. Bez obzira na povećanje intenziteta, t.j. jakosti izvora svjetla, opažamo sljedeće:



Slika 3.2: Demonstracija foto-efekta pomoću negativno nabijenog elektroskopa. Sklapanje listića elektroskopa pokazuje brz gubitak naboja uslijed foto-efekta. On se događa tek kad metalnu pločicu obasjava svjetlost valne duljine λ manje od neke valne duljine praga λ_{prag}, koja ovisi o tome od kojeg metala je pločica. Na pr., laki alkalni metali imaju λ_{prag} u vidljivom dijelu spektra: za kalij $\lambda_{prag} = 5,50 \cdot 10^{-7}\,\mathrm{m} = 0,550\,\mu m$, za natrij $0,540\,\mu m$, te za litij $0,500\,\mu m$. U originalnom Hallwachsovom pokusu to je bio cink, pa je $\lambda_{prag} = 0,287\,\mu m$, što je u ultraljubičastom dijelu elektromagnetskog spektra. Za željezo i srebro na primjer, λ_{prag} su još kraće, $0,262\,\mu m$ odnosno $0,261\,\mu m$.

- a) Ako je instrument električno nabijen pozitivno, nikad ne opažamo nikakav učinak tog obasjavanja, kakvo god ono bilo.

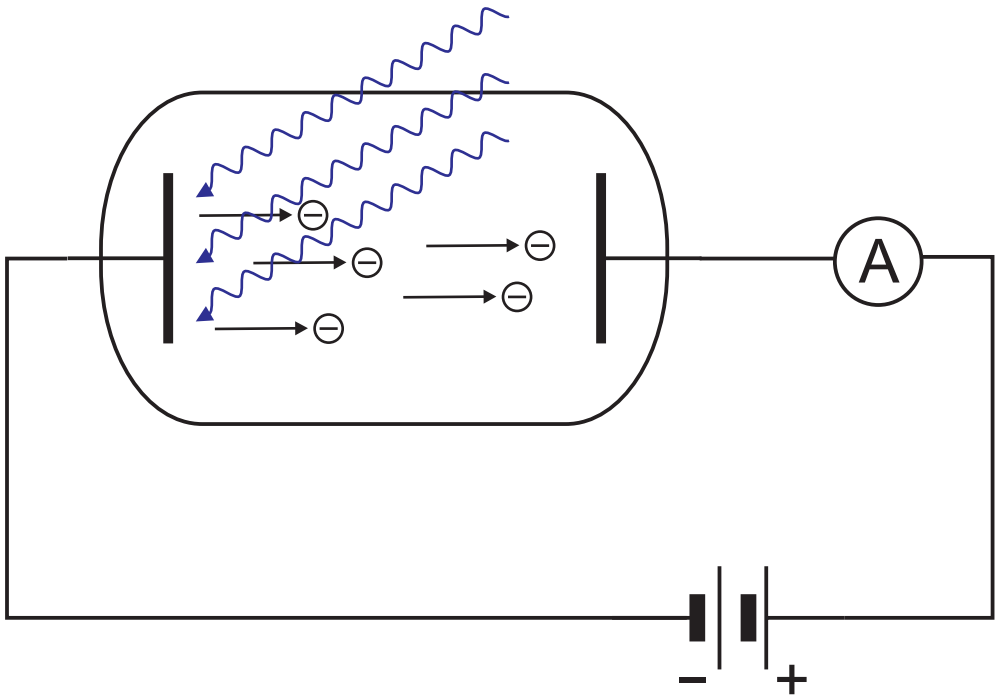
- b) Ako je pak instrument nabijen negativno, opažamo brz gubitak naboja *ako* pločicu obasjavamo svjetlom koje sadrži dovoljno kratke valne duljine λ, odnosno dovoljno visoke frekvencije $\nu = c/\lambda$. Kolika je maksimalna valna duljina λ_{prag} odnosno minimalna frekvencija ν_{prag} pri kojoj opažamo brz izboj, ovisi o kemijskom sastavu pločice. Ako je ona od cinka, kao u originalnom Hallwachsovom pokusu, potreban nam je svjetlosni izvor koji sadrži ultraljubičastu komponentu (na pr. živina lampa ili plamen izgaranja magnezija). Obasjavanje cinčane pločice nema nikakvog učinka ako izvor zrači samo valne duljine veće od ultraljubičaste, t.j. samo vidljivu i infracrvenu svjetlost (kao na pr. obična žarulja).

- c) Ako instrument u početku niti nije bio nabijen, obasjavanje metalne pločice valnim duljinama kraćim od λ_{prag}, uzrokovat će na instrumentu mali pozitivni naboj.

Nakon Hallwachsovog pokusa je postalo jasno da se kod fotoelektričnog efekta pod utjecajem svjetlosti događa izbacivanje negativnog naboja iz metala (pa se tako olakšava i iskrenje u Hertzovim pokusima). Ali, nije postojala nikakva teorija, nikakvo adekvatno objašnjenje što se, kako i zašto sve to događa. Misterij se počeo razrješavati 1899. godine. Tada su J. J. Thomson i P. Lenard pokusima s vakuumskim cijevima pokazali da se pri foto-efektu izbacuju negativno nabijene čestice i da su to upravo elektroni. (Te elektrone, oslobođene pri foto-efektu, nazovimo *foto-elektronima*.)

Međutim su Lenardovi pokusi 1902. godine otkrili nove misteriozne činjenice. Proučavajući kako svojstva izbačenih elektrona ovise o intenzitetu i frekvenciji svjetlosti, ustanovio je da o intenzitetu (dakle energiji koju donosi svjetlost u jedinici vremena) ovisi samo *broj* izbačenih elektrona, ali njihova *energija* ovisi samo o frekvenciji. Lenard je u biti došao do empiričkih činjenica koje smo temeljito i pažljivo izrekli u sljedećoj sekciji, te označili s **I, II** i **III**. Einstein je 1905. godine na temelju Lenardovih rezultata formulirao svoju hipotezu o kvantima elektromagnetskog polja, "česticama svjetla", fotonima.

Lenardovi su rezultati bili dosta neprecizni jer su u ono vrijeme takvi eksperimenti bili teško provedivi. Einsteinovu znanstvenu intuiciju, smjelost i



Slika 3.3: Foto-efekt je pogodno proučavati u vakuumskim cijevima. Valovite linije označavaju elektromagnetsko zračenje koje upada na jednu od elektroda. U eksperimentalnoj fazi kad je u pitanju sama detekcija foto-efekta, zgodno je tu elektrodu priključiti na negativni, a suprotnu na pozitivni potencijal. To naime pogoduje skupljanju što većeg broja izbijenih elektrona na kolektorskoj elektrodi i tako omogućava ampermetru (A) detekciju struje i kod vrlo slabih intenziteta elektromagnetskog zračenja. (Naravno, valja primijeniti samo slabe potencijale, za koje nema nikakve sumnje da bi mogli nekako – na pr. hladnom emisijom – utjecati na sâm proces nastanka foto-efekta i izazvati spuriozno pojačanje fotoelektrične struje.)

duboko razumijevanje fizike pokazuje i to što je bio u stanju uvesti ideju fotona na temelju takvih ograničenih, kvalitativnih eksperimentalnih podataka. S druge strane, to je značilo da Einsteinova teorija zapravo još *nije* bila eksperimentalno dokazana. Vodeći američki eksperimentalni fizičar R. Millikan, kao i mnogi drugi, nije prihvaćao fotonsku hipotezu jer ju je gledao kao napad na valnu teoriju svjetla i elektromagnetizma općenito. Zato se poduhvatio toga da sve što je u vezi foto-efekta radio Lenard, on napravi precizno, kvantitativno i potpuno, kako bi opovrgao Einsteina i potvrdio valnu, klasičnu elektrodinamiku. Radio je deset godina uporno i mukotrpno da nadiđe Lenardova ograničenja. Na primjer, razvio je tehniku struganja i poliranja metala unutar vakuumskih cijevi, jer je oksidacija metala (zbog nesavršenog vakuuma) bila jedan od problema koji su Lenardu ograničili preciznost.

Kao što ćemo vidjeti u idućoj sekciji, Millikan je usput našao novu metodu mjerenja Planckove konstante do na 0.5% točnosti [25], te na koncu 1916. godine morao zaključiti da njegovi eksperimenti nipošto ne ruše, nego naprotiv, nepobitno dokazuju Einsteinovo objašnjenje foto-efekta. Za njega je Einstein dobio Nobelovu nagradu 1921. godine. Sâm Millikan se međutim sigurno utješio kad je i on (1923. godine) također dobio Nobelovu nagradu za svoje precizne eksperimente s foto-efektom.

3.5 Einsteinovo objašnjenje foto-efekta

Sâmo *postojanje* foto-efekta nije iznenađujuće sa stanovišta klasične elektromagnetske teorije, jer se znalo da materija sadrži elektrone, i da se baš unutar metala relativno "slobodno" kreće jako mnogo elektrona jer to metalima i daje visoku električnu vodljivost. Uostalom, i proučavanje termoemisivnosti elektrona iz vrućih metala pokazuje da pojedini elektron može napustiti metal ako mu se zagrijavanjem dade neka minimalna energija, tzv. *izlazni rad*. Onda je jasno da se u principu i apsorpcijom elektromagnetskog zračenja elektroni mogu tako ubrzati da pobjegnu iz potencijala koji ih inače sprečava da napuste komade metala. Ipak, valna teorija svjetlosti, kao ni klasična fizika općenito, nikako ne može objasniti foto-efekt. Naime, ako razmotrimo četiri bitne *kvantitativne* empiričke činjenice u donjem tekstu, istaknute debelim tiskom kao **I** – **IV**, postaje jasno da druga i treća zahtijevaju Planckovu kvantnu hipotezu, te da se čak i ona mora proširiti i

radikalizirati zbog četvrte točke.

I. Kad postoji fotoelektrični efekt, to jest kad se može opaziti struja izbijenih elektrona, ona je proporcionalna intenzitetu izvora svjetlosti, dakle kvadratu amplitude elektromagnetskog polja koje izbija elektrone iz tijela. – Ova činjenica je shvatljiva i očekivana i sa stanovišta klasične fizike, jer je energija koju nosi elektromagnetski val proporcionalna njegovom intenzitetu, t.j. kvadratu njegove amplitude $\mathbf{E}$. Jednostavno zbog sačuvanja energije, tome mora biti proporcionalan i broj elektrona izbijenih u jedinici vremena.

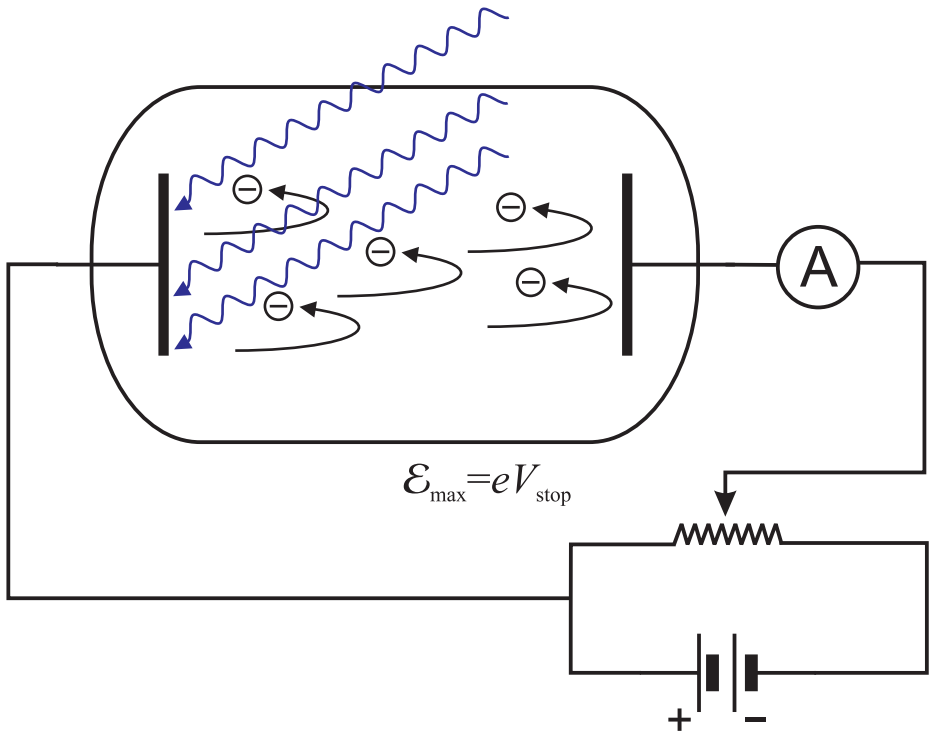
II. Ima li foto-efekta uopće ili ga nema, t.j. da li se iz pojedinog metala elektroni izbijaju ili ne, ovisi samo o frekvenciji svjetlosti koja ga obasjava. Za svaki metal postoji za njega karakteristična *frekvencija praga* ν_{prag}, i **samo elektromagnetsko zračenje frekvencije** ν **veće od** ν_{prag} **može izbiti elektrone iz tog metala.** – Dakle, ako previše smanjimo frekvenciju, nestat će foto-efekta bez obzira koliko je velik intenzitet ($\propto \mathbf{E}^2$) zračenja. S druge strane, bez obzira koliko mi taj intenzitet smanjili, za $\nu > \nu_{prag}$ registrirat ćemo izbijene elektrone, jedino što njihov broj (t.j. fotoelektrična struja) pada s intenzitetom u skladu s točkom **I**. Ovakva "sve ili ništa" zavisnost o frekvenciji praga je vrlo čudna sa stanovišta klasične elektromagnetske teorije, gdje energija elektromagnetskog vala ovisi jedino o njegovom intenzitetu, a nikako o njegovoj frekvenciji. Iz istog razloga, još je misterioznij i treći skup činjenica:

III. Energija izbijenih elektrona je neovisna o intenzitetu svjetlosti koja izaziva foto-efekt, ali ovisi o frekvenciji. Eksperiment prikazan na Slici 3.4 daje osobito jasnu frekventnu ovisnost *maksimalne* kinetičke energije ($\mathcal{E}_{max}$) izbijenih foto-elektrona – vidi Sliku 3.5. S nje je očito da $\mathcal{E}_{max}$ **o frekvenciji ovisi linearno:**

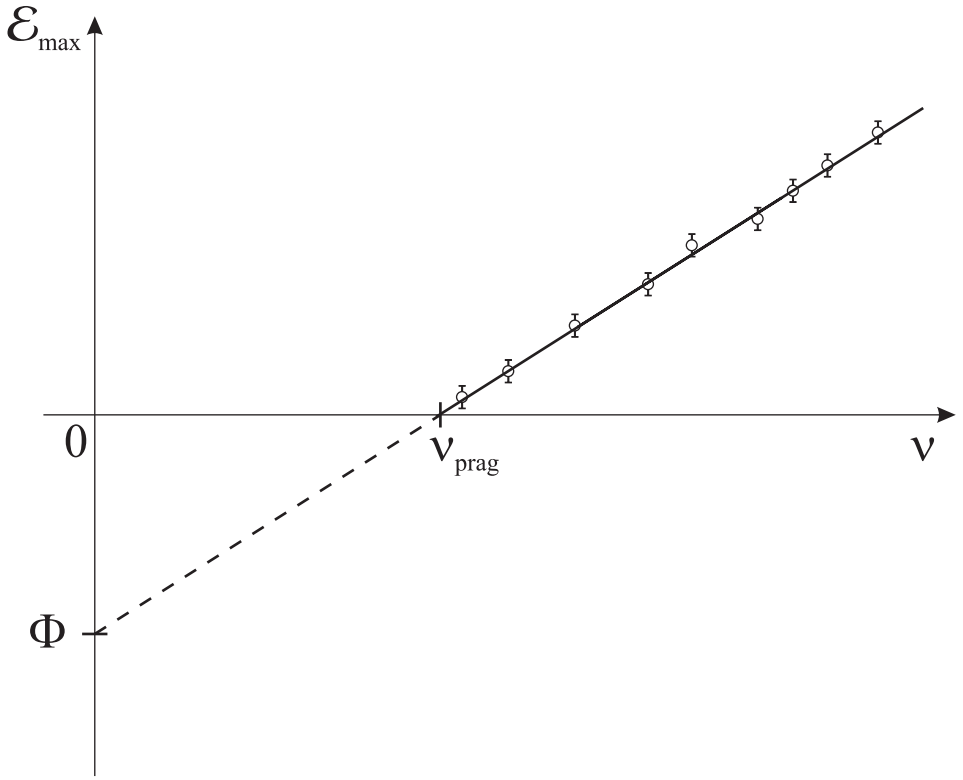
$$\mathcal{E}_{max} = h\nu - \Phi\,. \tag{3.1}$$

Precizna mjerenja $\mathcal{E}_{max}$ (na pr. Millikan [25]) pokazuju da je koeficijent smjera dat Planckovom konstantom h. Simbol Φ označava izlazni rad. On je različit za svaki pojedini metal, a s frekvencijom praga povezan je Planckovom konstantom:

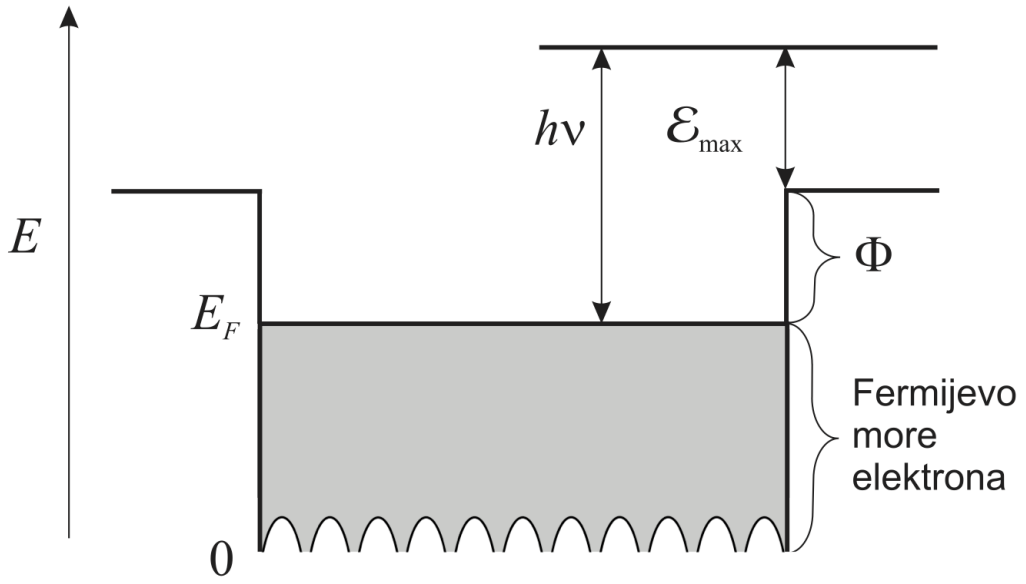
$$\Phi = h\nu_{prag}\,. \tag{3.2}$$



Slika 3.4: Mjerenje frekventne ovisnosti maksimalne energije $\mathcal{E}_{max}$ koju postižu foto-elektroni lako se postiže malom modifikacijom eksperimentalnog postava s prethodne slike. Upotrijebimo svjetlo relativno velikog intenziteta koje izbija vrlo mnogo foto-elektrona. Tada ih dovoljno pristigne na kolektorsku elektrodu tako da ampermetar može registrirati fotoelektričnu struju čak i onda kad polaritet izvora napona obrnemo tako da kolektorska elektroda postane odbojna. Zatim potenciometrom postepeno povećavamo taj odbojni napon V_{stop} tako da je elektronima sve teže stići na kolektorsku elektrodu, pa ampermetar registrira sve slabiju fotoelektričnu struju. Kad ona padne na nulu, znači da je V_{stop} tako velik da je zaustavio i odbio čak i one elektrone koji su foto-efektom primili najveću moguću energiju $\mathcal{E}_{max}$, te da smo ju izmjerili jer $\mathcal{E}_{max} = eV_{stop}$. Rezultati takvih mjerenja za razne frekvencije ν dati su na Slici 3.5.



Slika 3.5: Eksperimentalne točke pokazuju da je ovisnost maksimalne energije foto-elektrona o frekvenciji elektromagnetskog zračenja data formulom (3.1). (Eksperimentalne greške naznačene ovdje mnogo su veće nego u uhodanim mjerenjima. Već je Millikan 1916. postigao mnogo veću preciznost.)



Slika 3.6: Tzv. Sommerfeldov model raspodjele elektronskih energija u metalu koji objašnjava ovisnost $\mathcal{E}_{max} = h\nu - \Phi$ (3.1) i $\Phi = h\nu_{prag}$ (3.2). Njegov shematski karakter ne utječe na općenitu valjanost rezultata (3.1) i (3.2), jer nisu važni nikakvi detalji nego samo činjenica da je najviša energija elektronâ u metalu, E_M, za izlazni rad Φ manja od potencijalne energije elektrona koji tek toliko da se oslobodio iz potencijalne jame koja ga je vezala u metalu, pa mu kinetička energija teži nuli. (Vrijednost najviše elektronske energije E_M na apsolutnoj nuli temperature naziva se Fermijeva energija, E_F, tog metala.)

Frekventne ovisnosti **II** i **III**, a osobito precizna frekventna ovisnost (3.1) nikako se ne mogu objasniti klasično, dakle bez Planckove hipoteza o apsorpciji energije u diskretnim porcijama – kvantima $h\nu$. Einstein je uočio da je s njom, naprotiv, objašnjenje vrlo lagano, elegantno i prirodno. Od elektromagnetskog zračenja frekvencije ν, elektron vezan u metalu prima kvant energije $h\nu$ – vidi Sliku 3.6. Oni elektroni koji u tom metalu imaju najvišu energiju E_M, moraju od novodobivene energije $h\nu$ potrošiti samo energiju

Φ da pobjegnu iz potencijala koji ih veže u metalu. To su upravo oni foto-elektroni koji pri datoj frekvenciji ν imaju maksimalnu* kinetičku energiju $\mathcal{E}_{max}$, i evo nam formule (3.1). S druge strane, ako je frekvencija elektromagnetskog zračenja $\nu < \nu_{prag}$, apsorbirani kvant energije $h\nu < \Phi$ i elektron nije dobio dovoljno energije† da se odvoji od metala, pa ne dolazi do foto-efekta.

Dakle, kvantna hipoteza je uspješna i ovdje. Zamijetite da dosad nije bilo potrebno pretpostaviti ništa više nego kod Planckovog objašnjenja zračenja crnog tijela, t.j. da se energija može emitirati i apsorbirati samo u diskretnim porcijama, kvantima $h\nu$. Primjerice, dovoljna je pretpostavka da elektron može iz elektromagnetskog polja apsorbirati energiju samo u porcijama $h\nu$. Dovoljna je i, također planckovska, pretpostavka o *kvantizaciji energija oscilacija*. Ako je kvantizirana energija harmonički oscilirajućih naboja u izvoru elektromagnetskog zračenja, onda i od njih stvoreno elektromagnetsko polje na frekvenciji ν ima energiju $Nh\nu$ gdje je N cijeli broj. Zato je, posljedično, i ta energija kvantizirana. Ali, nigdje se nije pretpostavilo da je i *sâmo elektromagnetsko polje kvantizirano*.

Međutim, u svom slavnom objašnjenju foto-efekta 1905. godine, Einstein je upravo tom pretpostavkom otišao i dalje od Planckove hipoteze o kvantima energije. Elektromagnetsko polje nije više zamišljao kao klasičan, kontinuiran val, već da je ono na neki način "zrnato" na mikroskopskom nivou. Naime, postulirao je da se elektromagnetsko zračenje frekvencije ν sastoji od diskretnih kvanata, fotona, od kojih svaki pojedini nosi energiju $h\nu$. Dakle, *kvantno* elektromagnetsko polje bi se sastojalo od tih elementarnih pobuđenja, "česticâ svjetla". Tek u fizikalnim procesima u kojima istovremeno sudjeluje ogroman broj fotona, elektromagnetsko polje možemo opisati kao klasično valno polje Maxwellove elektromagnetske teorije. Doduše, tu spadaju gotovo sve elektromagnetske pojave koje možemo zapaziti u našem makroskopskom

*Naravno, iz razmatranja otpadaju oni elektroni koji su dio apsorbirane energije prije izlaska iz metala opet izgubili, na pr. u nekom sudaru, jer takvi ne mogu postići maksimalnu energiju $\mathcal{E}_{max}$.

†Doduše, dovoljno energije da nadmaši Φ iako $\nu < \nu_{prag}$, elektron može dobiti tzv. multi-fotonskom apsorpcijom. To je slučaj kada elektron apsorbira dva ili više fotona simultano, ili u tako brzom slijedu (unutar $\sim 10^{-15}$ s) da ne stigne pasti iz pobuđenog stanja prije nove apsorpcije. Međutim, zbog vrlo male vjerojatnosti takve višestruke apsorpcije, za nju je potrebna golema gustoća fotona. Zato se ona može realizirati tek uz upotrebu posebnih lasera veoma visokog intenziteta, a ne kod običnog foto-efekta, pa tu mogućnost ovdje ne razmatramo.

svijetu, uz rijetke iznimke kao što je foto-efekt, pa je teorija zasnovana na klasičnim Maxwellovim jednadžbama ipak spektakularno uspješna. Tu valja istaći i brojne uspjehe tzv. *poluklasičnog* pristupa kvantnim pojavama, u kojem se za elektromagnetsko zračenje upotrebljavaju klasična polja, a kvantni aspekti su drugdje, kao na pr. u tretmanu elektronâ i druge "materije" i u njihovim diskretnim, kvantiziranim energijama. Na primjer, u kvantnomehaničkom opisu atomâ i molekulâ dovoljno je već i klasično Coulombovo polje da se vrlo točno opiše interakciju između elektronâ i jezgarâ. Obično se ne mora uzimati u obzir da ono zapravo potječe od emisije i apsorpcije fotonâ[‡] na električnim nabojima.

Zapravo, gore smo vidjeli da se i činjenice **I**, **II**, **III** o foto-efektu također mogu shvatiti kroz planckovsku hipotezu o apsorpciji diskretnih kvanata energije, ali uz klasično elektromagnetsko polje; dakle, bez Einsteinovog fotonskog koncepta. Međutim, njega čini potpuno neizbježnim to što kod foto-efekta imamo i ovu empiričku činjenicu:

IV. Nikad nema (relevantnog) vremenskog zaostatka od trenutka kad svjetlost padne na materijal (odnosno atome) do trenutka emisije foto-elektrona.

Ono što je dostatno da objasni **I**, **II** i **III**, naime Planckova hipoteza da elektroni apsorbiraju diskretne kvante energije $h\nu$ iz elektromagnetskog polja, zbog **IV** više nije dovoljno ako je elektromagnetsko polje klasično. Naime, količina energije koju donese klasično elektromagnetsko zračenje intenziteta $\mathcal{I} = c\,\epsilon_0\langle\mathbf{E}^2\rangle$ snopom poprečnog presjeka površine A u vremenu τ (uz pretpostavku da je $\mathcal{I}$ konstantan preko cijele površine A) iznosi

$$\mathcal{I}\,A\,\tau \;=\; c\,\epsilon_0\langle\mathbf{E}^2\rangle\,A\,\tau\,, \tag{3.3}$$

gdje $\langle\mathbf{E}^2\rangle$ znači vremensku srednju vrijednost kvadrata električnog polja $\mathbf{E}$ (koja je, za harmoničku ovisnost polja, $\frac{1}{2}$ maksimalne vrijednosti polja). Vrijeme potrebno da se apsorbira energija $(h\nu)$ jednaka ili veća od izlaznog rada Φ, te da emisija foto-elektrona započne, bi zato bilo

$$\tau \;\geq\; \frac{\Phi}{\mathcal{I}\,A} \;=\; \frac{\Phi}{c\,\epsilon_0\langle\mathbf{E}^2\rangle A}\,. \tag{3.4}$$

[‡]Takvi efekti kvantne teorije elektromagnetskih polja moraju se u atomskoj fizici uzeti u obzir tek kad se zahtijevaju tako velike preciznosti teorijskog opisa da se mogu objasniti i izvanredno maleni efekti kao što je tzv. Lambov pomak u spektrima atomâ.

Time klasična teorija elektromagnetskih valova predviđa lako mjerljive vremenske zaostatke, od stotninki sekunde pa do preko sekunde, već za izvore intenzitetâ kakvi su rutinski na raspolaganju. (Vidi zadatke 3.4 i 3.5.) Ali, takvi se zaostaci nikad ne nalaze eksperimentalno, nego uvijek činjenica **IV**, bez obzira koliko se oslabi polje **E**. (Nalaze se samo mnogo, mnogo kraći vremenski zaostaci, u attosekundama ili najviše stotinama attosekundi (as), 1 as $= 10^{-18}$ sekundi [26, 27, 28] koji dakle nemaju veze s predikcijom (3.4) pa nisu relevantni, a potječu od vremenskih skalâ kvantnih procesa u atomima.) Dakle, ako u ovoj situaciji inzistiramo na klasičnom elektromagnetskom polju, foto-efekt bi značio nesačuvanje energije. S druge strane, fotonska teorija, t.j. koncept kvantnog elektromagnetskog polja, nema tu nikakvih problema jer implicira da do foto-efekta dolazi tako da se apsorpcija energije na elektronu događa *odjednom*, u trenutku interakcije elektrona i "zrnca svjetlosti" – fotona. Kvadrat amplitude polja, koji je u klasičnoj teoriji polja proporcionalan gustoći energije zračenja, u kvantnoj je teoriji polja proporcionalan i prosječnom broju fotona po jedinici volumena, pa očito ni u njoj nema problema s objašnjenjem činjenice **I**.

Ne čudi da je Plancku i mnogim drugima koji su prihvaćali kvante energije, bilo vrlo teško prihvatiti Einsteinove kvante elektromagnetskog polja, fotone. (Ekstreman slučaj upornog odbijanja fotonske hipoteze ipak predstavlja Bohr, koji je dugo bio skloniji prihvatiti čak i nesačuvanje energije, nego fotone.) Mnogo je lakše bilo povjerovati da su kvantizirane oscilacije "materije" (na pr. nabojâ u materijalu predmeta koji su emitirali elektromagnetsko zračenje) nego da je kvantizirano sâmo elektromagnetsko polje. Bilo je tako jer se o atomima znalo toliko malo da je bilo prostora da im se pripišu najneobičnija svojstva kako bi se objasnile fizikalne pojave. Nasuprot tome, elektromagnetsko zračenje se činilo savršeno opisano klasičnim Maxwellovim jednadžbama pa tu naizgled nije bilo prostora za ikakve promjene ili dopune. Fotonska teorija je zato postala općeprihvaćena tek nakon što je 1923. godine dobila odlučnu potvrdu kroz Comptonov efekt, ali je onda postala začetak daljnjeg razvoja kvantne teorije u smjeru *kvantne teorije polja*. Po njoj su sve elementarne kvantne čestice ("mikro-čestice") zapravo diskretna pobuđenja odgovarajućeg kvantiziranog polja, po analogiji s fotonima, "česticama svjetlosti" elektromagnetskog polja.

3.6 Zadaci 3

3.1.) Kolika je $\mathcal{E}_{max}$ elektrona koje iz cinka izbija ultraljubičasto zračenje valne duljine 240 nm? Izlazni rad cinka je 3,6 eV. Može li i vidljivo svjetlo proizvesti foto-efekt na cinku?

3.2.) Kolika može biti energija foto-elektrona koju iz površine komada volframa izbija ultraljubičasto svjetlo valne duljine 200 nm? Valna duljina fotoelektričnog praga volframa je 230 nm. Može li i vidljivo svjetlo proizvesti foto-efekt na volframu?

3.3.) Koliki je izlazni rad cezija ako se foto-elektroni izbijeni iz njega ultraljubičastim svjetlom valne duljine 200 nm, zaustavljaju potencijalom $V_{stop} = 4,21$ V? Može li i vidljivo svjetlo proizvesti foto-efekt na ceziju?

3.4) Laserska zraka intenziteta $\mathcal{I} = 200$ W/m^2 obasjava atom natrija. Izlazni rad za natrij je $\Phi = 2.3$ eV, što možemo koristiti kao donju granicu ionizacijske energije atoma (I). Naime, unutar komada metala, mnogo je elektrona već otpušteno iz atoma da se kreću slobodno unutar metala, pa možemo pretpostaviti $\Phi \lesssim I$. Radijus atoma natrija možemo po redu veličine ocijeniti $r \approx 1$Å. Koliki vremenski zaostatak τ do ionizacije slijedi iz pretpostavke klasičnog elektromagnetskog polja, to jest, iz formule (3.4)?

(Odgovor: $\tau \gtrsim 0.06$ s – vidi Zbirku riješenih zadataka iz kvantne fizike. Toliki (pa i mnogo manji) vremenski zaostatak bio bi lako mjerljiv, ali nikada nije bilo opaženo nešto slično.)

3.5) Monokromatski, točkasti izvor svjetlosti valne duljine 500 i snage 50 W obasijava metalnu ploču udaljenu 1.5 m. Radijus atoma u metalu iznosi 1 Å. Izlazni rad metala je 4 eV.

(a) Ima li pojedinačni foton iz izvora dovoljno energije da izbaci elektron iz metala?

(b) Pretpostavimo da atom može kontinuirano apsorbirati svjetlost. Koliko vremena treba da se elektron emitira iz metala? Iskoristite to što je ioniza-

cijska energija atoma (I) uvijek nešto veća od izlaznog rada Φ iz komada metala, $I \gtrsim \Phi$ (vidi prethodni zadatak). Ukazuju li ikakva empirička opažanja na takav proces? Što to znači za pretpostavku o kontinuiranoj apsorpciji svjetlosti?

(c) Kao i (b), ali sad pretpostavite da sâm elektron može kontinuirano apsorbirati svjetlost koja pada na njega. Iskoristite podatak da on ima samo eksperimentalnu gornju granicu veličine, $R_{\text{elektron}} \leq R_{\text{e-max}} < 10^{-18}$ m.

Rješenje: (a) U kvantnomehaničkom računu energija fotona je

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = 2.48 \text{ eV} \,, \tag{3.5}$$

gdje $\lambda = 500 \ = 5000$ Å$= 5 \cdot 10^{-7}$ m, $E = 2.48 \ < 4 \ = \Phi$, pa fotoni ove valne duljine ne mogu izazvati fotoefekt na zadanoj metalnoj ploči.

(b) Izvor svjetlosti snage $\mathcal{P}$ zrači izotropno. Na udaljenosti d od izvora snaga zračenja po jedinici površine je $\mathcal{P}/(4\pi d^2)$. Snaga koju apsorbira atom geometrijske "površine presjeka" $r^2\pi$ na udaljenosti d od izvora je $\mathcal{P}(r^2\pi)/(4\pi d^2)$. U vremenu t atom apsorbira energiju $E(t) = \mathcal{P}(r^2\pi/(4\pi d^2))t$. Kada $E(t)$ dostigne energiju ionizacije atoma, $E = I$ (koja je pak omeđena odozdo izlaznim radom, $I > \Phi$), elektron bi trebao biti izbačen iz atoma.

$$I = \mathcal{P}\,\frac{r^2\pi}{4\pi d^2}\,t > \Phi\,, \quad \text{pa slijedi} \quad t > \frac{\Phi}{\mathcal{P}}\left(\frac{2d}{r}\right)^2 = 11.5 \text{ s} \,, \tag{3.6}$$

gdje $\mathcal{P} = 50$ W, $d = 1.5$ m, $r = 1$Å$= 10^{-10}$m i $\Phi = 4 \ = 4 \cdot 1.602 \cdot 10^{-19}$ J.

(c) Kao i kod (b), samo što sada kontinuirano apsorbirana energija $E(t)$ mora dostići upravo izlazni rad Φ:

$$\Phi = \mathcal{P}\,\frac{R_{\text{elektron}}^2\,\pi}{4\pi d^2}\,t\,, \quad \text{pa dakle} \quad t = \frac{\Phi}{\mathcal{P}}\left(\frac{2d}{R_{\text{elektron}}}\right)^2 \,, \tag{3.7}$$

gdje je "površina presjeka" elektrona omeđena odozgo *ekstremno malenom* eksperimentalnom granicom veličine elektrona $R_{\text{elektron}} \leq R_{\text{e-max}} < 10^{-18}$ m, pa slijedi kozmološki golemo vrijeme

$$t \geq \frac{\Phi}{\mathcal{P}}\left(\frac{2d}{R_{\text{e-max}}}\right)^2 = 11.5 \cdot 10^{+16} \text{ s} \approx 3.7 \cdot 10^{+9} \text{ godina} \,. \tag{3.8}$$

Eksperimentalno, pri fotoelektričnom efektu (odnosno fotoionizaciji atoma) nikada nisu opaženi vremenski zaostaci, do na gorespomenute ekstremno malene attosekundne ($\sim 10^{-18}$ s) zaostatke, koji potječu od vremenskih skala kvantnih procesa u atomima. Međutim nikada nisu opaženi zaostaci nekoliko redova veličina manjih od sekunde (kao u prethodnom zadatku) ili čak većih od sekunde (kao u ovom zadatku), a koji bi bili nužna posljedica klasičnog, kontinuiranog elektromagnetskog polja. Zato je jasno da se *na razini mikroskopskih objekata kakvi su atomi i elektroni*, apsorpcija energije iz EM vala ne dogadja na kontinuiran način. Dakle, eksperiment opovrgava takvu pretpostavku.

Poglavlje 4

Comptonov efekt – konačan dokaz fotona

4.1 Klasična raspršenja elektromagnetskih valova

Prema klasičnoj elektrodinamici, raspršenje elektromagnetskog zračenja na električno nabijenim česticama događa se tako što upadno zračenje valne duljine λ prisiljava nabijenu česticu na titranje frekvencijom tog zračenja. Zbog toga ona sama u svim smjerovima emitira zračenje iste te frekvencije, odnosno valne duljine λ. To je poznato *Thomsonovo raspršenje* [29] prema kojem postoji kutna ovisnost *intenziteta* raspršenog zračenja, ali ne i valne duljine. Preciznije, intenzitet je proporcionalan $(1 + \cos^2\theta)$, gdje je θ kut izmedju smjera upadne radijacije i smjera pod kojim promatramo raspršenu radijaciju. Prema klasičnom Thomsonovom izvodu, valna bi duljina morala za svaki kut raspršenja θ biti jednaka valnoj duljini upadnog zračenja.

Valna se duljina ne mijenja ni kod raspršenja na neutralnim česticama. Takvo je *Rayleighovo raspršenje* vidljivih valnih duljina na molekulama zraka, koje objašnjava plavu boju vedrog neba, te crvenkastu zoru i sumrak. Mehanizam raspršenja na neutralnim česticama je nešto složeniji nego kod Thomsonovog raspršenja na slobodnim nabojima, ali ga ipak lako razumijemo ako

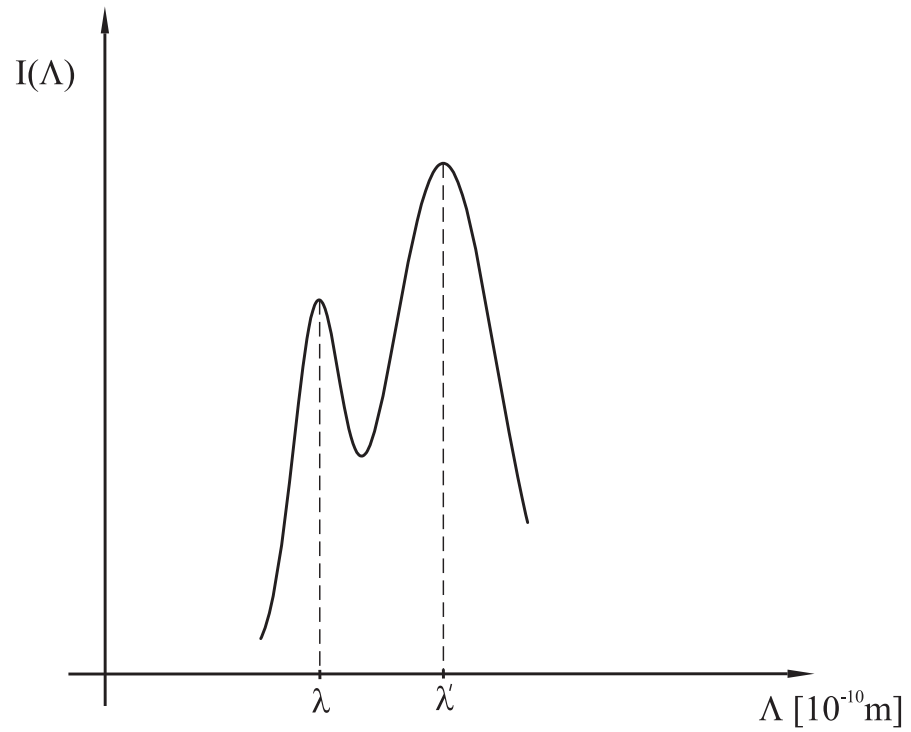
uočimo da upadno zračenje na neutralnim česticama izaziva polarizaciju. Na primjer, i molekule zraka su u cjelini neutralne. Ipak, električno polje svjetlosnog vala djeluje na naboje unutar molekule, pa razdvaja pozitivne od negativnih naboja. Tako polarizira molekulu, koja postaje mali oscilirajući dipol čije zračenje predstavlja raspršenu svjetlost. No njena valna duljina odnosno frekvencija opet nije promijenjena, jer polarizacija titra istom frekvencijom kao i upadni val koji ju je uzrokovao. Taj kvalitativni aspekt ostaje isti i kod *Mieovog raspršenja*, koje za razliku od Rayleighovog, nije ograničeno na raspršivače znatno manje od valne duljine upadnog zračenja, nego povećanjem njihove veličine (preko kapljica aerosola, kristalića leda, komadića čađe, zrnaca prašine, itd.) glatko dovodi do limesa geometrijske optike. Tu valna duljina više niti nema nikakvu ulogu, pa ni tu, kao ni drugdje, ne može doći do njene promjene raspršenjem. (Nego samo tako da se apsorpcijom upadnog zračenja tokom vremena materijal raspršivača zagrije toliko, da sâm počne zračiti na odgovarajućim valnim duljinama. Međutim, miješanje raspršenja s tako nečim lako se izbjegne).

Dakle, bez daljnjega zaključujemo da (u klasičnoj fizici) **nema načina da elektromagnetskim valovima raspršenjem promijenimo valnu duljinu odnosno frekvenciju**.

4.2 Comptonovo raspršenje mijenja valnu duljinu

Ipak, već je 1913. godine J. A. Gray prilikom svojih pokusa uočio da raspršenjem elektromagnetskog zračenja može doći do povećanja njegove valne duljine. A. H. Compton je 1922. g. taj fenomen točno izmjerio prilikom ozračivanja grafitnih i metalnih metâ rendgenskim, t.j. X-zrakama, te pronašao neočekivanu kutnu ovisnost raspršenih valnih duljina [13]. Za dani kut raspršenja θ (za koji je raspršena radijacija skrenuta s obzirom na smjer upadne), Compton je uočio dvije komponente u spektru raspršene radijacije, kao na pr. na Slici 4.1.

Jedna komponenta je imala valnu duljinu λ kao i upadna radijacija, a druga **povećanu** valnu duljinu λ'. U neskladu s klasičnim očekivanjima, to pove-



Slika 4.1: Raspršenjem rendgenskog zračenja valne duljine $\lambda = 0.708 \cdot 10^{-10}$ m na grafitu, pod kutom $\theta = 87^\circ$ dobiva se ovakva spektralna raspodjela intenziteta raspršenog zračenja. Dakle, $I(\Lambda)$ je intenzitet izmjeren na valnoj duljini Λ. Prvi maksimum nalazi se na $\Lambda = \lambda$, tj. na valnoj duljini upadnog zračenja. Drugi maksimum je na $\Lambda = \lambda' = 0.731 \cdot 10^{-10}$ m i odgovara komponenti povećane valne duljine λ' u jednadžbi (4.1). Umjesto oštrih linija na $\Lambda = \lambda$ i $\Lambda = \lambda'$ imamo prilično široke raspodjele oko tih vrijednosti. Glavni uzrok je to što u realnom eksperimentu Compton nije imao izvor savršeno monokromatskog upadnog zračenja, nego raspodjelu valnih duljina oko maksimuma na valnoj duljini λ, pa se to odražava i u raspršenom zračenju čiji intenzitet prikazuje ova slika. Još jedno odstupanje od realne situacije je to da elektroni na kojima se upadno zračenje raspršuje zapravo nisu slobodni i ne miruju kao na Slici 4.2. Ti su elektroni vezani u atomima, ali u njima ne miruju, $\boldsymbol{p}_e \neq 0$, nego njihovi impulsi $\boldsymbol{p}_e$ imaju neku raspodjelu *oko prosječnog* impulsa $\langle \boldsymbol{p}_e \rangle = \mathbf{0}$. Zato je Slika 4.2 samo idealizacija realne eksperimentalne situacije, ali koja dobro odgovara prosječnom impulsu elektronâ na kojima se elektromagnetsko zračenje raspršuje. Ta idealizacija ne utječe na slaganje teorijskog rezultata (4.13) s eksperimentalnim rezultatom (4.1) .

ćanje je bilo precizno dano sljedećom ovisnošću o kutu raspršenja θ:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_C\,(1 - \cos\theta) = 2\,\lambda_C\,\sin^2\frac{\theta}{2}\,, \tag{4.1}$$

gdje je λ_C konstanta iznosa $\lambda_C = 2,43\cdot 10^{-12}$ m, danas poznata pod nazivom Comptonova valna duljina elektrona.

Compton (i nezavisno Debye) je uspio 1923. g. teorijski izvesti empirički rezultat (4.1) tako što je usvojio pretpostavku da se elektromagnetsko zračenje sastoji od fotonâ energije $E_\gamma = h\nu$, te da se individualni fotoni elastično raspršuju na elektronima sudarajući se s njima pojedinačno. To je bio najdirektniji, odlučni dokaz za čestični karakter elektromagnetskog zračenja.

U takvom raspršenju čestičnog tipa očekujemo odboj elektrona i, posljedično, smanjenje energije fotona nakon sudara, $E'_\gamma = h\nu' < E_\gamma$, pa zato očekujemo i povećanje fotonske valne duljine $\lambda' = c/\nu'$. U izvodu se sačuvanje ukupne energije i vektora impulsa dakle koristi na jednostavan način primjeren elastičnom srazu čestica, kao na primjer kod sudara (idealnih) biljarskih kugli:

$$E_\gamma + E_e = E'_\gamma + E'_e\,, \tag{4.2}$$

$$\boldsymbol{p}_\gamma + \boldsymbol{p}_e = \boldsymbol{p}'_\gamma + \boldsymbol{p}'_e\,, \tag{4.3}$$

gdje smo elektronu (e) i fotonu (γ) označili prim-crticom energije E'_e, E'_γ i impulse $\boldsymbol{p}'_e$, $\boldsymbol{p}'_\gamma$ *nakon* sudara.

Da bi se izbjegle nepotrebne aproksimacije, u izvodu relacije (4.1) valja koristiti relativistički izraz za energiju čestice mase mirovanja m i impulsa $\boldsymbol{p}$:

$$E = \sqrt{(m\,c^2)^2 + c^2\,\boldsymbol{p}^{\,2}}\,. \tag{4.4}$$

(Nerelativistički izraz za kinetičku energiju $T = \boldsymbol{p}^{\,2}/2\,m = m\,\boldsymbol{v}^{\,2}/2$ je najniži član (član nultog reda u $1/c^2$) u razvoju relativističke energije (4.4) umanjene za energiju mirovanja $E_0 = m\,c^2$:

$$E - mc^2 = mc^2\sqrt{1 + \frac{\boldsymbol{p}^{\,2}}{m^2c^2}} - mc^2 = mc^2\,\left(1 + \frac{1}{2}\,\frac{\boldsymbol{p}^{\,2}}{m^2c^2} + ...\right) - mc^2$$

$$= \frac{p^2}{2\,m} + ... = \frac{m\,v^2}{2\,(1 - v^2/c^2)} + ... = \frac{m\,v^2}{2} + ... \equiv T + ... \tag{4.5}$$

gdje su p i v veličine vektora impulsa $\boldsymbol{p}$ i brzine $\boldsymbol{v}$, dakle $p \equiv |\boldsymbol{p}|$, i analogno za brzinu i druge vektore.)

Budući da se fotoni uvijek (u vakuumu) kreću brzinom svjetlosti c, masa im mora biti egzaktno jednaka nuli, $m_\gamma = 0$. Zato za fotone relacija između energije E_γ i impulsa $\boldsymbol{p}_\gamma$ postaje

$$E_\gamma = c\, p_\gamma \,. \tag{4.6}$$

Elektron ima masu m_e i impuls $\boldsymbol{p}_e$, pa mu je energija

$$E_e \;=\; \sqrt{(m_e\, c^2)^2 \;+\; c^2\, p_e^2}\;. \tag{4.7}$$

Kao i (4.4), to je energija slobodne čestice, a znamo da su pri Comptonovom pokusu elektroni zapravo vezani električnim silama u atomima mete. Ipak, upotreba energije (4.7), to jest, zanemarivanje energije vezanja tih elektronâ i postupanje s njima kao da su slobodni, ovdje predstavlja izvrsnu aproksimaciju. Naime, energije vezanja elektronâ zaslužnih za Comptonov efekt (4.1) ne prelaze red veličine od desetak eV, što je mnogo manje od energije fotonâ rendgenskog zračenja ($E_\gamma \gtrsim$ keV ili veća).

Do rezultata (4.1) će nas najjednostavnije dovesti analiza kinematičkog slučaja prikazanog na Slici 4.2, gdje se foton početnog impulsa $\boldsymbol{p}_\gamma$ sudara sa slobodnim elektronom koji prije sraza miruje. Zato mu početni impuls iščezava, $\boldsymbol{p}_e = \boldsymbol{0}$, a početna energija mu je jednaka energiji mirovanja, $E_e = m_e c^2$. Tada sačuvanje energije (4.2) daje

$$c\, p_\gamma \;+\; m_e\, c^2 \;=\; c\, p'_\gamma \;+\; \sqrt{(m_e\, c^2)^2 + c^2\, {p'_e}^2}\;, \tag{4.8}$$

ili preglednije

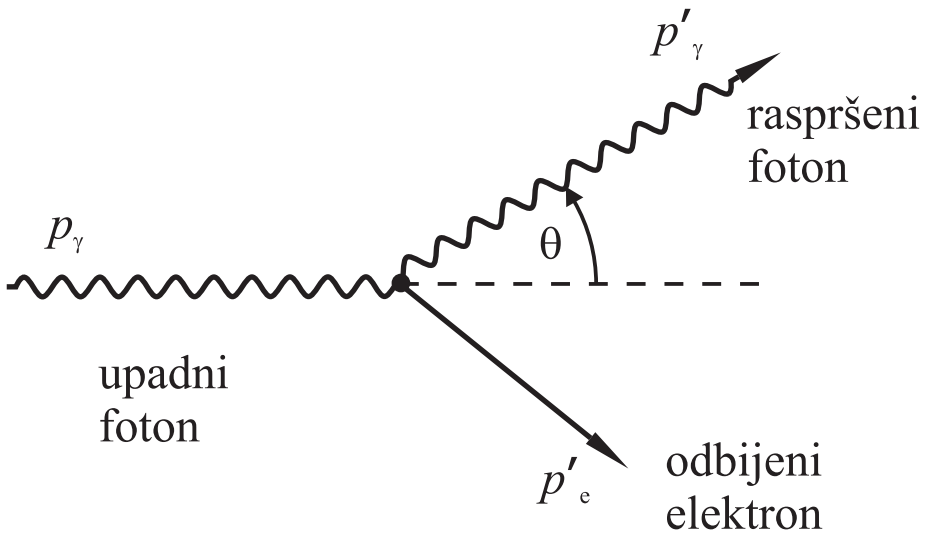
$$p_\gamma - p'_\gamma + m_e c = \sqrt{(m_e c)^2 + {p'_e}^2}\,, \tag{4.9}$$

a nakon kvadriranja i kraćenja članova $(m_e c)^2$,

$$(p_\gamma - p'_\gamma)^2 + 2(p_\gamma - p'_\gamma) m_e c = p_\gamma^2 + {p'_\gamma}^2 - 2\, p_\gamma\, p'_\gamma + 2\,(p_\gamma - p'_\gamma) m_e c = {p'_e}^2\,. \tag{4.10}$$

Međutim, ${p'_e}^2$ na desnoj strani možemo potpuno izraziti impulsima fotonâ zahvaljujući sačuvanju impulsa (4.3), koje za ovu jednostavnu kinematiku ($\boldsymbol{p}_e = \boldsymbol{0}$) daje

$${p'_e}^2 = (\boldsymbol{p}_\gamma - \boldsymbol{p}'_\gamma)^2 = p_\gamma^2 + {p'_\gamma}^2 - 2\, \boldsymbol{p}_\gamma \cdot \boldsymbol{p}'_\gamma = p_\gamma^2 + {p'_\gamma}^2 - 2\, p_\gamma\, p'_\gamma \cos\theta\,. \tag{4.11}$$



Slika 4.2: Comptonovo raspršenje za idealizirani slučaj slobodnog elektrona koji miruje prije sudara s fotonom.

Izjednačavanjem, kraćenjem p_γ^2 i ${p'_\gamma}^2$, te dijeljenjem s $2p_\gamma\, p'_\gamma$, vidimo da nas sačuvanje energije i impulsa dovodi do

$$\left(\frac{1}{p'_\gamma} - \frac{1}{p_\gamma}\right) m_e\, c \;=\; 1 - \cos\theta\,. \tag{4.12}$$

Sada se samo valja prisjetiti da fotoni očito ipak nisu sasvim obične čestice, nego su karakterizirani i valnim svojstvima: frekvencijom i valnom duljinom. Budući da su im energije $E_\gamma^{(\prime)} = h\nu^{(\prime)}$, relacija (4.6) kaže da su im veličine impulsâ $p_\gamma = h\nu/c = h/\lambda$ i $p'_\gamma = h\nu'/c = h/\lambda'$. Odmah slijedi

$$\Delta\lambda \;=\; \lambda' - \lambda \;=\; \frac{h}{m_e c}\,(1 - \cos\theta)\,. \tag{4.13}$$

Time smo ne samo teorijski objasnili empiričku relaciju (4.1), nego i izveli izraz za Comptonovu valnu duljinu elektrona i objasnili njen iznos:

$$\lambda_C \;=\; \frac{h}{m_e c} \;=\; 2,4263102387 \cdot 10^{-12} \quad \mathrm{m}\,. \tag{4.14}$$

(Danas se još češće upotrebljava takozvana reducirana Comptonova valna duljina $\lambda\!\!\!^{-}_C = \lambda_C/(2\pi)$. Ona je za faktor 2π manja od izvorne (4.14), jer je definirana preko isto tako reducirane Planckove konstante $\hbar \equiv h/2\pi$:

$$\lambda\!\!\!^{-}_C \;=\; \frac{\hbar}{m_e c} \;=\; 3,8615926796 \cdot 10^{-13}\,\mathrm{m}\;. \tag{4.15}$$

($\hbar \;=\; 1,054571817 \cdot 10^{-34}$ J s $\;=\; 6,582119569 \cdot 10^{-22}$ MeV s.)

Treba istaći da smo objasnili ne samo promijenjenu ("ne-elastičnu") λ'-komponentu raspršenog zračenja, nego i postojanje nepromijenjene ("elastične") λ-komponente, u kojoj je valna duljina ostala ista. Ona, za razliku od komponente s promijenjenom valnom duljinom, ne dolazi od raspršenja na pojedinačnim elektronima, nego na cijelom atomu. To znači raspršenje fotona opet na elektronima*, ali tako duboko vezanima u atomu da je velika vjerojatnost da ih interakcija s fotonom ne izbaci iz atoma, nego ostanu vezani, pa se promjena impulsa prenese na cijeli atom. Dakle, cijeli atom trpi odboj, pa Sliku 4.2 ne primjenjujemo na elektron nego na cijeli atom. Kako u tom slučaju u Comptonovoj valnoj duljini ne dolazi m_e nego mnogo tisuća puta veća masa cijelog atoma, očito je tada povećanje valne duljine $\Delta\lambda$ tako maleno da je praktički neprimjetno.

Slično razmatranje pokazuje zašto Comptonov efekt i na elektronima primjećujemo tek kod X-zraka, tj. elektromagnetskog zračenja relativno visoke frekvencije ν. Dijeljenjem s $\lambda = c/\nu$, relacija (4.13) postaje

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \;=\; \frac{\lambda'}{\lambda} - 1 \;=\; \frac{p_\gamma}{m_e\, c}\,(1 - \cos\theta) \;=\; \frac{h\nu}{m_e\, c^2}\,(1 - \cos\theta)\,. \tag{4.16}$$

Ovaj oblik jasno pokazuje da će $\lambda'/\lambda = p_\gamma/p'_\gamma = h\nu/h\nu'$ zamjetno odstupiti od 1 (tj. Comptonov efekt će biti primjetan) samo ako je energija upadnog fotona $E_\gamma = h\nu$ nezanemariva u usporedbi s $m_e c^2$, energijom mirovanja raspršivača – u ovom slučaju elektrona. U suprotnom, ako $h\nu << m_e\, c^2$, pojedinačni foton nema dovoljno energije da sâm uzrokuje nezanemariv odboj elektrona ili neko drugo nezanemarivo gibanje elektrona. Dakle, u granici relativno niske energije fotona, $h\nu/m_e c^2 << 1$, možemo vidjeti samo klasične pojave (kao što je Thomsonovo raspršenje) koje su rezultat kolektivnog

*Raspršenje fotona se događa i na pozitivno nabijenoj atomskoj jezgri. No, u odnosu na doprinos elektrona, taj se doprinos intenzitetu $I(\Lambda)$ pokazuje zanemarivim. Naime, tzv. udarni presjek za takav proces potisnut je kvadratom omjera masâ elektrona i jezgre.

djelovanja ogromnog broja fotonâ koji zajedno čine klasični elektromagnetski val.

Međutim, upozorimo da se *ne* radi o tome da bi to mnoštvo fotonâ sačinjavalo neki medij na kojem se onda javljaju valovi proizvoljnih valnih duljinâ, kao što se na pr. mnoštvo molekulâ vode kondenzira u tekućinu koja se onda može zatalasati na raznim valnim duljinama koje nisu, bar ne direktno, date svojstvima pojedinačne molekule vode (na pr. njenom veličinom ili masom). Za razliku od toga, svaki pojedini foton ima valna svojstva povezana sa svojstvima elektromagnetskog vala u kojem sudjeluje, jer je kroz svoju energiju $h\nu = hc/\lambda$ karakteriziran svojom frekvencijom odnosno valnom duljinom. Dakle, iako smo u Comptonovom efektu kinematiku sudara (4.2)-(4.3) tretirali kao kod biljarskih kugli, foton nije čestica u klasičnom smislu, jer svaka pojedina "čestica svjetla" ima i valna svojstva. To je smisao valno-čestičnog dualizma mikro-objekatâ ("kvantonâ") koji se prvi puta pojavio u fizici kroz Einsteinovu fotonsku hipotezu.

4.3 Zadaci 4

4.1.) Pokažite da je povećanje energije elektrona pri Comptonovom raspršenju, tj. dio energije koji s upadnog fotona prijeđe na odbijeni elektron, $\Delta E_e \equiv E_\gamma - E'_\gamma = h\nu - h\nu'$, dat formulom

$$\Delta E_e = \frac{2[h\nu \sin(\theta/2)]^2}{m_e c^2 + 2h\nu \sin^2(\theta/2)} = h\nu \, \frac{2\,\frac{\lambda_C}{\lambda}\,\sin^2(\theta/2)}{1 + 2\,\frac{\lambda_C}{\lambda}\,\sin^2(\theta/2)} \,. \tag{4.17}$$

Izvrijednite tu formulu za nekoliko vrijednosti fotonske energije (recimo $E_\gamma = h\nu$ od nekoliko keV-a) i nekoliko kuteva raspršenja fotona θ od nekoliko desetaka stupnjeva.

4.2.) Izrazite energiju fotona prije Comptonovog raspršenja preko kuta raspršenja fotona, kuta odboja elektrona i mase elektrona. Iskoristite sačuvanje energije i impulsa. Izračunajte tu energiju E_γ za nekoliko vrijednosti tih kuteva.

4.3.) Iskoristite zakon sačuvanja energije i impulsa da dokažete da
a) slobodni elektron koji miruje u vakuumu ne može apsorbirati foton, te da
b) elektron koji se u vakuumu pravocrtno jednoliko giba, ne može emitirati foton.

4.4.) Foton i elektron gibaju se kolinearno, ali u suprotnim smjerovima, dok ne pretrpe čeoni sudar. Neka elektron ima mnogo veću energiju od fotona, $E_e = \sqrt{(m_e c^2)^2 + p_e^2 c^2} >> E_\gamma = h\nu$, bez obzira koliko je velik ili malen impuls elektrona p_e. Pokažite da je energija fotona koji se raspršio (odbio) u smjeru suprotnom od prvotnog smjera dana formulom

$$E'_\gamma \equiv h\nu' = h\nu \, \frac{(E_e + p_e c)^2}{m_e^2 \, c^4 + 2\, h\nu \, (E_e + p_e c)} \, . \tag{4.18}$$

Za ultra-relativistički slučaj $E_e \approx p_e c >> m_e c^2$, pokažite da je

$$E'_\gamma \equiv h\nu' \approx h\nu \, \frac{4\, {E_e}^2}{4\, h\nu \, E_e} = E_e \approx c\, p_e \, , \tag{4.19}$$

to jest, da dolazi do golemog pojačanja prvotne energije fotona,
$E_\gamma = h\nu << E'_\gamma$.

Poglavlje 5

Prvi uvidi u strukturu atoma i put od stare kvantne prema pravoj kvantnoj teoriji

U prethodna četiri poglavlja detaljno smo izložili ideje s kojima je začeta kvantna fizika: Planckove kvante energije elektromagnetskog polja i Einsteinove kvante sâmog elektromagnetskog polja, te kako su te ideje o kvantima i valno-čestičnoj dualnosti u kontekstu elektromagnetskog zračenja dobile eksperimentalnu potvrdu preciznim mjerenjima fotoelektričnog efekta i otkrićem Comptonovog efekta.

U ovom ćemo poglavlju objasniti kako je Bohr [12] upotrijebio neke od tih idejâ u pokušajima da se shvati građa atoma, koju su eksperimentalno počeli otkrivati Rutherford i suradnici. Osim uspjehâ Bohrovog modela, detaljno ćemo obrazložiti i gdje je neuspješan, jer će nam to ukazati da se u atomu elektron ne kreće po određenoj putanji poput onih u klasičnoj mehanici, suprotno Bohrovim pretpostavkama. Pokazat ćemo da inzistiranje na takvim oštro određenim putanjama (stazama, trajektorijama, orbitama) vodi u proturiječje, te da od njih u kvantnom području moramo odustati. Međutim, pokazat ćemo i da je za objašnjenje vodikovog spektra dovoljan rezultat za određenu prosječnu veličinu, za što su potrebna teorijska predviđanja o vjerojatnostima. Razvoj u tom smjeru je pokrenulo proširenje valno-čestičnog dualizma s fotona i na masivne čestice poput elektrona, što

je ideja de Broglievih valova [14]. Potraga za njihovom valnom jednadžbom dovela je do **Schrödingerove jednadžbe** [15] **za valove vjerojatnosti**, a daljnjom razradom i do teorije novog tipa, vrlo različite od klasične teorije. To je i danas najšire korištena formulacija moderne kvantne teorije, a nazivamo ju kvantna mehanika.

5.1 Rutherfordovo raspršenje otkriva jezgru atoma

O građi atomâ se početkom XX stoljeća gotovo ništa nije znalo. Naravno, bilo je jasno da ako je u nekom neutralnom atomu vezano Z elektronâ, svaki negativnog naboja $-e$, onda u atomu mora nekako biti raspoređen i pozitivan naboj $+Z\,e$. Većinom se smatralo da bi atomi morali biti građeni otprilike kao "puding sa šljivama"; ili, geometrijski potpunije opisano, kao "lubenica": u usporedbi s atomom lagani i po pretpostavci relativno maleni, elektroni bi poput koštica bili uloženi u pozitivni naboj, koji bi pak bio razmazan po cijelom (po pretpostavci otprilike kuglastom) volumenu atoma. Tako se mislilo jer je, u skladu s klasičnom fizikom, izgledalo da će se takvim modeliranjem najlakše naći stabilna konfiguracija negativnih elektrona pomiješanih s pozitivnim nabojima u atomu.

Međutim, to su 1911. opovrgli epohalni eksperimenti u Rutherfordovom laboratoriju, jer su otkrili potpuno drugačiju strukturu atoma, koja je sa stanovišta do tada poznate fizike izgledala potpuno nestabilno: kao što smo iznijeli u uvodnom poglavlju, u sekciji 1.2, oni su nesumnjivo pokazali da je sav pozitivni naboj zajedno sa skoro cijelom masom atoma koncentriran u malenom području (nazvanom nukleus ili jezgra), oko 10000 puta manjem od atoma. Veličina atoma, od oko 10^{-10} m, je prema tome potjecala od gibanja mnogo lakših negativnih elektronâ relativno daleko od masivne jezgre; dakle, od gibanja elektronâ u njima privlačnom Coulombovom potencijalu,

$$U(r) = \mathrm{k_c}\,\frac{+Z\,e}{r} \quad (\mathrm{k_c} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\ \text{za SI jedinice, a u cgs sustavu}\ \mathrm{k_c} = 1), \quad (5.1)$$

kao što se planeti gibaju oko Sunca u njegovom gravitacijskom potencijalu.

No u klasičnoj fizici svi akcelerirani naboji zrače elektromagnetske valove. To znači da, za razliku od neutralnih planeta, i kružeći naboji moraju zračiti i tako gubiti energiju. Zato klasična fizika predviđa brz pad kružeće

negativno nabijene čestice na pozitivno nabijenu jezgru (v. Zadatak 5.1.), a drugačije ponašanje se ne može objasniti klasičnom fizikom. Stoga je gore opisano eksperimentalno otkriće Rutherforda, Geigera i Marsdena bilo posve neočekivano, zbog očite stabilnosti atoma.

S druge strane, činilo se da njihovi eksperimenti potvrđuju da se i "mikroskopske" čestice gibaju po putanjama koje slijede iz klasičnih, Newtonovih zakona gibanja. Ti su eksperimenti proučavali skretanje putanjâ nerelativističkih, pozitivno nabijenih projektila, konkretno α-česticâ (tj. jezgara helija, naboja $+z\,e = +2\,e$) kod prolaska kroz vrlo tanku zlatnu foliju. Skretanja su ogromnom većinom bila za male kuteve: više od 99% α-česticâ je skrenulo za manje od 3°, a prosječni kut raspršenja je bio oko $\sqrt{\overline{\Theta^2}} \approx 1^\circ$. To se slagalo s Lenardovim kvalitativnom zaključkom već godinama prije, nakon njegovih eksperimenata s katodnim zrakama (dakle - elektronima) da se atomi sastoje uglavnom od praznog prostora, a nije bilo u suprotnosti ni s predviđanjima Thomsonovog modela atoma s razmazanim pozitivnim nabojem. Za opovrgavanje tog modela "lubenice" presudan je bio onaj maleni postotak α-česticâ s relativno velikim kutevima raspršenja, reda veličine desetaka stupnjeva (a otprilike jedna α-čestica od 20000 bi skrenula za kut čak veći od 90°). Naime, takvi kutevi nikako nisu mogli biti uzrokovani raspršenjem niti na laganim elektronima, a niti na pozitivnom naboju razmazanom po cijelom atomu, jer takva raspodjela naboja ne daje elektrostatsko odbijanje koje je dovoljno snažno za tako jako skretanje α-česticâ.

Skretanja za relativno velike kutove, kao i njihov broj (odnosno malen postotni udio), mogla su se objasniti samo *elastičnim* raspršenjima pozitivnih α-česticâ na objektu *mnogo manjem* od atoma, tj. na jezgri radijusa $R \lesssim 10^{-14}$ m, ali *koja sadrži skoru svu masu atoma i sav pozitivan naboj* $+Ze$. (Konkretno, $+Ze = +79\,e$ za atome zlata). Pretpostavljamo sfernosimetričnu raspodjelu naboja u jezgri, pa je u njoj središte Coulombovog potencijala (5.1) za $\forall r \geq R$. U njemu projektili istog predznaka kao jezgra imaju pozitivnu potencijalnu energiju $V(r) = z\,e \times \text{Eq.}(5.1) = z\,e\,U(r)$, pa na njih djeluje odbojna, čisto radijalna Coulombova sila $\boldsymbol{F} \equiv -\nabla V(r) = F_r(r)\,\mathbf{e}_r$, gdje

$$F_r(r) \;\equiv\; -\,\frac{\partial V(r)}{\partial r} \;=\; +\,\mathrm{k_c}\,\frac{z\,Z\,e^2}{r^2}\,, \qquad \text{te} \qquad \mathbf{e}_r \;\equiv\; \frac{\boldsymbol{r}}{r}\,. \tag{5.2}$$

Potencijalna energija projektila $V(r)$ je velika kad je r mali. To jest, kada su blizu jezgri, $r \sim R$, tada na projektile djeluje velika odbojna Coulombova

sila $F_r \sim +\,\mathrm{k_c}\, z\, Z\, e^2/R^2$.

Skretanja α-česticâ zbog privlačenja s elektronima su zanemariva, jer su one preko 7000 puta masivnije. No one su i nekoliko desetaka puta manje masivne od jezgara zlata, pa se u dobroj aproksimaciji može zanemariti i odboj jezgara zbog međudjelovanja s njima.

Pod tim pretpostavkama i aproksimacijama, Rutherfordov problem raspršenja može se teorijski tretirati na temelju poznatih rezultata klasične mehanike [32] za gibanje u polju centralne sile $F_r \propto 1/r^2$. To znači: analogno slavnom Keplerovom problemu planetarnog gibanja, samo što je tamo (gravitacijska) sila privlačna pa su putanje planeta *elipse*, a u Rutherfordovom problemu je Coulombova sila odbojna pa su putanje α-česticâ *hiperbole*.

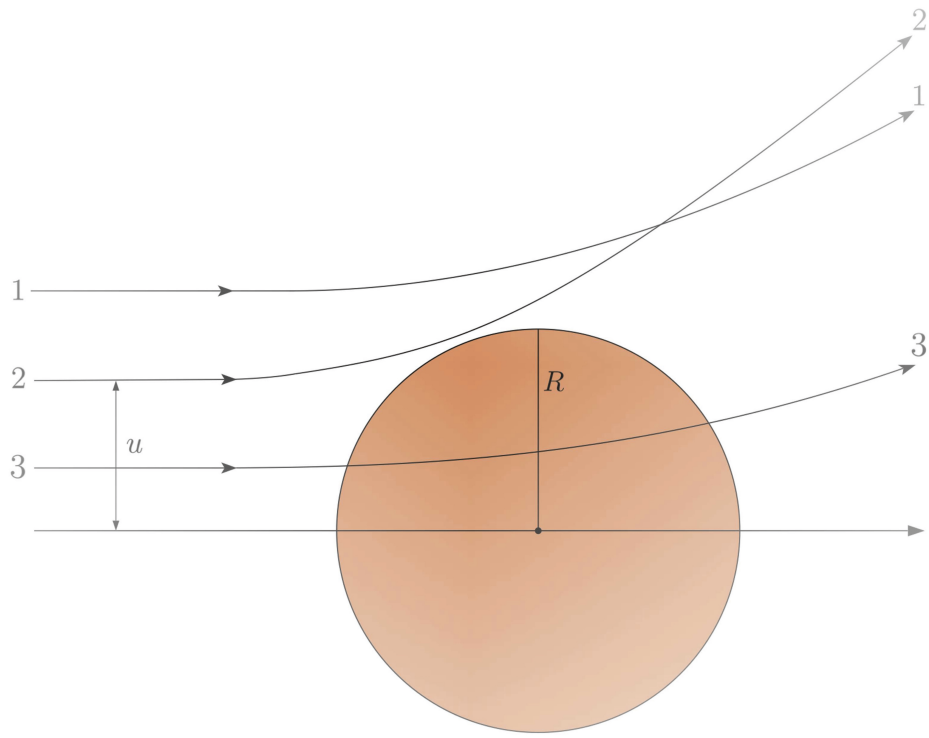
Tako je Rutherford potpuno klasičnim izvodima došao do teorijskih predikcija koje se izvrsno slažu s eksperimentalnim podacima. Na primjer, **osim** za previše male kutove raspršenja (otprilike $\Theta \lesssim 5^\circ$), broj α-česticâ (ili drugih projektila, naboja $+z\,e$, čije se raspršenje proučava) raspršenih u infinitezimalni kutni interval između Θ i $\Theta + d\Theta$ je precizno dat formulom

$$dN = N(\Theta)\, d\Theta \;=\; I \rho\, d \left(\mathrm{k_c}\, \frac{z\, Z\, e^2}{4\, T_\infty\, \sin^2 \frac{\Theta}{2}} \right)^2 2\pi\, \sin\Theta\, d\Theta\,. \qquad (5.3)$$

Tu je $T_\infty = M v_\infty^2/2$ nerelativistička asimptotska (za $r \to \infty$, tj., i ulazna i izlazna) kinetička energija projektila mase M i brzine v_∞, a I je broj tih projektila upalih na foliju debljine d centimetara, koja sadrži ρ atoma po kubičnom centimetru. Kut Θ je kut raspršenja nakon prolaska projektila kroz cijelu debljinu folije.

Detaljna analiza problema Rutherfordovog raspršenja, te izvodi relevantnih relacija, i (5.3) i drugih (poput tzv. Rutherfordovog udarnog presjeka) mogu se naći, na primjer, u Poglavlju 4 knjige Eisberga i Resnicka [31]. Ovdje ćemo samo kvalitativno, pomoću Slike 5.1, razmotriti neke karakteristične putanje projektilâ pri raspršenju na jednom atomu odnosno njegovoj jezgri.

Slika 5.1 pokazuje četiri tipične putanje pozitivno nabijenog projektila za četiri različite vrijednosti **ulaznog parametra** u, definiranog kao udaljenost između osi kroz središte jezgre i asimptotske putanje (ulaznog pravca) koja je u velikoj udaljenosti paralelna s tom osi. Dakle, kad bi putanja projek-



Slika 5.1: Tipične putanje, za razne ulazne parametre u, električno nabijenog projektila pri njegovom Rutherfordovom raspršenju u odbojnom elektrostatskom potencijalu naboja raspodijeljenog u sfernoj jezgri radijusa R. Uz numerirane putanje, i os predstavlja putanju projektila (za $u = 0$): jednu od onih koje prolaze kroz jezgru (kao i putanja 2) *ako* je ulazna kinetička energija T_∞ dovoljno velika; a ako nije, onda se na osi realizira putanja koja dostiže najmanju moguću udaljenost $r_{\min}$ (5.4), pa odboj unatrag, za $\theta = 180°$.

tila, ovdje α-čestice, samo produžila paralelno s osi kao da interakcije nema, promašila bi centar elektrostatske sile jezgre za tu udaljenost u.

Ako je ulazni parametar veći od radijusa jezgre, $u > R$, kao kod putanje 1, situacija je jednostavna: što manji u, projektil prilazi jezgri to bliže. Tu je kulonsko odbijanje pozitivno nabijenih projektila jače, pa putanja bude skrenuta od ulaznog pravca za veći kut θ. Jasno je da se kut tako povećava sve dok se u smanjuje do $u = R$; tu se, ovisno o brzini projektila, ulazi u režim mogućih okrznuća ili čak prodiranja projektila u jezgru. To se ipak ne mora dogoditi ni kada $u < R$, ako projektil odbojna Coulombova sila skrene prije toga. To ilustrira putanja 2, gdje je u nešto manji od R, ali dovoljno jako odbijanje dovodi do (umalo) okrznuća jezgre i kuta skretanja većeg nego kod putanje 1, pa i kod putanje koja bi imala točno $u = R$.

Dakle, kad je ulazni parametar manji od radijusa jezgre R, postoje dvije mogućnosti:

- *i)* Ako projektil ima ulaznu (tj. asimptotsku, u $r \to \infty$) kinetičku energiju T_∞ koja nije veća od potencijalne energije $V(r)$ za $r = R$, Coulombova sila će uvijek spriječiti prodor u jezgru. Najmanja moguća udaljenost projektila do centra Coulombovog potencijala, $r_{\min}$, zbog $V(r_{\min}) = T_\infty$, iznosi

$$r_{\min} \;=\; \mathrm{k_c}\,\frac{z\,Z\,e^2}{T_\infty} \;=\; \mathrm{k_c}\,\frac{z\,Z\,e^2}{Mv_\infty^2/2}\;. \tag{5.4}$$

Sve dok nema prodiranja projektila u jezgru (tj., $r_{\min} > R$), projektil osjeća Coulombovu silu (5.2) kao da je naboj jezgre točkast, tako da i dalje vrijedi: **što manji u, to veći kut skretanja**, odnosno odbijanja. U krajnjem slučaju, na osi imamo $u = 0$ i $\theta = 180^\circ$, kada se i dostiže $r_{\min}$ (5.4).

- *ii)* Međutim, dovoljno brze α-čestice imaju dovoljno veliku ulaznu kinetičku energiju $T_\infty > V(R)$ da mogu savladati barijeru odbojne Coulombove potencijalne energije. Tada će za $u < R$ prodrijeti unutar raspodjele naboja jezgre i probiti se kroz nju, kao u slučaju putanje 3 na Slici 5.1 (ili na pr. u slučaju da putanja točno slijedi os zbog $u = 0$). Tada se situacija mijenja jer se mijenja oblik sile. Ne radi se samo o tome da α-čestica u jezgri osjeća još i jaku privlačnu nuklearnu silu. Za nju Rutherford nije ni znao, ali mu je bilo jasno da za takve čestice onda više nije točno da se kreću pod utjecajem Coulombove sile (5.2). Odbojna elektrostatska sila je tada očito slabija od (5.2) jer dio jezgrinog naboja s jedne strane putanje djeluje suprotno ostatku

naboja s druge strane putanje, pa će efikasnost skretanja biti manja. (Dakle, iz istog razloga zašto atomski model "lubenice" daje samo male kutove skretanja, i za putanje koje prolaze kroz jezgru dobivaju se manji kutovi skretanja nego za putanje koje ne prolaze.)

Međutim, kako je Rutherfordova relacija (5.3) izvedena pod pretpostavkom gibanja pod utjecajem Coulombove sile točkastog naboja (5.2), to jest, upravo pod pretpostavkom da nema penetracije projektila u jezgru, gornji slučaj *ii)* dovodi do metode mjerenja radijusa jezgre (R): samo treba ustanoviti kinetičku energiju $T_\infty = T_{\infty,R}$ na kojoj eksperimentalni podaci više nisu dobro opisani relacijom (5.3). To možemo tako da na nekom odabranom kutu Θ, za kojeg se relacija (5.3) slaže s mjerenjima za neku ulaznu kinetičku energiju T_∞, ta mjerenja nastavimo, ali uz postepeno povećavanje ulazne kinetičke energije T_∞. Time se postiže sve manja i manja minimalna udaljenost $r_{\min}$ (5.4). Konačno će se doseći vrijednost $T_{\infty,R}$ na kojoj koje će izmjerena vrijednost $N(\Theta)$ pasti ispod teorijske vrijednosti (5.3). To je znak da je počelo prodiranje projektilâ u jezgru, tj., da je minimalna udaljenost $r_{\min}$ (5.4) dosegla vrijednost radijusa jezgre, $r_{\min} \approx R$. Rutherford, Geiger i Marsden su našli tipične veličine raznih jezgara $R \sim 10^{-14}$ m, i time započeli eksperimentalna istraživanja nuklearne fizike.

Već smo objasnili kako je Rutherfordova formula (5.3), tamo gdje je eksperimentalno potvrđena, dovela je do planetarnog, ili bolje rečeno, nuklearnog modela atomske strukture. No još nismo rekli da je pretpostavka valjanosti (5.3), uz zamjenu mete od zlata ($Z = 79$) drugim kemijskim elementima, omogućila ustanovljavanje njihovih vrijednosti Z, te shvaćanje da je Z zapravo kemijski atomski broj datog elementa (tj., broj elektronâ u atomu). Kako on za mnoge elemente do tada nije ni bio poznat, ne čudi da je Rutherford dobio Nobelovu nagradu za kemiju.

Dakle, slaganje Rutherfordove formule (5.3) s eksperimentom je dovelo do epohalnih otkrićâ u atomskoj fizici i kemiji, a tamo gdje je nastupilo neslaganje s eksperimentom (slučaj *ii*) bilo je posve jasno zašto, te je i to dovelo do početka istraživanja atomskih jezgara.

To, da je Rutherford teorijski izveo svoje empirički izvanredno uspješne formule poput (5.3) na potpuno klasičan način, svakako je pridonijelo tome da Bohr (kao što ćemo izložiti u sljedećoj sekciji) za elektron vezan u atomu

vodika usvoji analogan pristup, samo za *privlačnu* Coulombovu silu, $-(5.2)$. Dakle, to je pristup s osloncem na klasična rješenja Keplerovog problema, a to su staze u obliku kružicâ i/ili elipsâ.

Međutim, kako će se pokazati da klasične staze dovode do proturiječja, još kasnije – u riješenom Zadatku 6.6. – vratit ćemo se na pitanje kako to da je klasična fizika mogla dati uspješne izvode Rutherfordovih formula poput (5.3).

5.2 Bohrov model - plodan iako pogrešan

Rutherfordov planetarni ili jezgreni model atoma [11] je bio empirički vrlo čvrsto utemeljen, jer je izvrsno objašnjavao eksperimentalne podatke iz raspršenja α-čestica. Međutim, stabilnost i diskretan spektar zračenja tako građenih atomâ bili su neobjašnjivi klasičnom fizikom. (Vidi Zadatak 5.1.) Zato je Niels Bohr zaključio da u atomskoj domeni moraju vrijediti (i) neki novi fizikalni zakoni. Pitao se kakvom bi dopunom zakona fizike mogao postići napredak u razumijevanju atoma a da izbjegne konflikt sa klasičnim fizikalnim zakonima. Naime, oni su očito uspješno opisivali ponašanje makroskopskih sustavâ – ali ne samo makroskopskih, jer, kao što smo opisali u prethodnoj sekciji, Rutherford je klasičnu mehaniku uspješno primijenio i pri izvodu teorijskih relacija koje su objašnjavale eksperimentalne podatke o Rutherfordovom raspršenju, koje je dalo prvi eksperimentalni uvid u strukturu atoma.

Kao i Planck i većina drugih fizičara, i Bohr je zato želio zadržati što više od klasičnih zakona; na pr. da su elektron i proton u atomu vezani statičkom Coulombovom interakcijom, da vrijede Newtonovi zakoni, zakon sačuvanja energije, itd. Međutim, zaključio je da:

A) elektron u atomu može imati samo neke diskretne, tj. **kvantizirane** energije i njima odgovarajuće orbite. One su određene tzv. **kvantnim uvjetima** koji dovode do "nove fizike" tako što izražavaju neke fizikalne veličine preko Planckove konstante h i cijelih, tzv. **kvantnih brojeva**.

B) Potpuno klasično ponašanje se mora opet dobiti u limesu vrlo velikih kvantnih brojeva. To je slavni Bohrov **princip korespondencije**.

Bohr je uspio teorijski dobiti eksperimentalni spektar atoma vodika (1.3) [tj. frekvencije (5.19) date dolje] predloživši model atoma koji je proizlazio iz klasičnih fizikalnih zakona *ali modificiranih tako da se reproducira stvarno ponašanje atoma*. Ono što se nije moglo objasniti ili izvesti, a bilo je nužno empirički, on je jednostavno nametnuo kao *postulat*. (Naravno, uz nadu da će se objašnjenje naći naknadno, kasnijim razvojem teorije.) Na primjer, za razliku od kasnije razvijene moderne kvantne teorije, Bohr nije mogao naći objašnjenja čak niti za stabilnost osnovnog stanja "planetarnog" atoma, pa je (uz ostalo) tu empiričku činjenicu osigurao postulatom koji možemo izreći* ovako:

I. Stacionarna stanja i putanje

Atom ima takozvana "stacionarna stanja", među kojima je i stanje najniže energije (osnovno stanje). U takvim stanjima, elektron vezan u atomu kruži po putanjama (orbitama, stazama, trajektorijama) određenim zakonima klasične mehanike. Međutim, suprotno zakonima klasične elektrodinamike, elektron *ne* zrači sve dok orbitira po putanjama koje pripadaju stacionarnim stanjima. Elektron emitira elektromagnetsko zračenje samo kad skoči iz nekog od stacionarnih stanja više energije u neko stacionarno stanje niže energije.

(Po tom postulatu, osnovno stanje je očito **apsolutno** stabilno.)

Kada pak atom emitira elektromagnetsko zračenje, frekvencija mu je po sljedećem, drugom postulatu data Planck-Einsteinovom relacijom $E = h\nu$:

---

*Ponovo napominjemo da se ne držimo strogo povijesnog razvoja, pa ni Bohrovih formulacija doslovno, nego po smislu.

II. Energija i frekvencija zračenja pri kvantnim skokovima

Prijelazom iz stanja više energije E_n u stanje niže energije E_m emitira se elektromagnetsko zračenje frekvencije određene zakonom sačuvanja energije i Planckovom hipotezom o kvantima energije, dakle relacijom

$$h\nu_{mn} = E_n - E_m \,. \tag{5.5}$$

Atom može inverznim procesom apsorbirati kvant energije odgovarajuće frekvencije i tako iz nekog stanja niže energije prijeći u neko stanje više energije.

(Iako ovdje nije apsolutno nužno, prirodno je reći da se prilikom kvantnih skokova emitiraju i apsorbiraju fotoni. Spomenuli smo da se Bohr protivio takvoj modifikaciji elektrodinamike, ali primijetite da je jedna njena drastična modifikacija također prisutna u njegovom prvom postulatu!)

Glavni uspjeh Bohrovog modela je reproduciranje spektra vodikovog atoma – dakle, klasično neobjašnjive Balmerove formule (1.2) i njene generalizacije (1.3) za frekvencije elektromagnetskog zračenja vodikovih atoma. Bohrov model naime omogućava teorijski izvod točnog rezultata za diskretne energije E_n stacionarnih stanja elektrona u atomu vodika. (Taj rezultat za energijski spektar E_n ostaje egzaktno isti i u razvijenoj, modernoj kvantnoj teoriji, gdje se dobiva rješavanjem Schrödingerove jednadžbe.) Pokazat ćemo da se to postiže *postuliranjem jednog kvantnog uvjeta* na impuls vrtnje elektrona, ili, alternativno, na kružne putanje elektrona. U našem izlaganju naglasak će biti na ovom drugom – na kvantizaciji putanja.

Rutherfordov planetarni model za atom općenitog atomskog broja Z težak je za teorijsku analizu putanja elektrona, jer osim kulonskog privlačenja jezgre iz središta atoma, elektroni osjećaju i nezanemarivo kulonsko odbijanje drugih elektrona. Zato ćemo Bohrove postulate primijeniti na jednoelektronske sustave, prvenstveno atom vodika gdje $Z = 1$, ali i $(Z-1)$-struko

ionizirane atome proizvoljnog Z (He^+, Li^{++}, itd.). Tu otpadaju komplikacije uslijed kulonskog odbijanja između raznih elektrona. Jedina sila na elektron koju moramo uzeti u obzir je elektrostatičko privlačenje iz središta jezgre. Zato, kad se prisjetimo da po prvom Bohrovom postulatu orbitirajući elektroni *ne* gube energiju klasičnim elektromagnetskim zračenjem, možemo pokušati primijeniti dobro poznata rješenja [32] Newtonovih jednadžbi za Keplerov problem planetarnog gibanja pod utjecajem centralne sile. Ona bi, pod uvjetom da su konzistentna s Bohrovim postulatima, morala vrijediti egzaktno za staze elektrona u Bohrovom modelu jednoelektronskih sustavâ. Po tim rješenjima, čestica mase m koju privlači centralna sila koja opada s kvadratom udaljenosti r, dakle sila oblika

$$\boldsymbol{F}(r) \,=\, F_r(r)\,\mathbf{e}_r \,=\, -\,\frac{K}{r^2}\,\mathbf{e}_r\,, \qquad (\,\mathbf{e}_r \,\equiv\, \frac{\boldsymbol{r}}{r}\,)\,, \tag{5.6}$$

zarobljena je tom silom i giba se po elipsi *ako* njena ukupna energija E zadovoljava

$$-\,\frac{1}{2}\frac{K^2 m}{L^2} \le E < 0\,, \qquad (\,\text{gdje } L \neq 0\,)\,. \tag{5.7}$$

Oznaka $L \equiv |\boldsymbol{L}|$ je veličina impulsa vrtnje

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}\,, \tag{5.8}$$

koji je sačuvan, konstantan vektor (i po veličini i po smijeru) *za slučaj gibanja pod utjecajem centralne sile*. Pritom je i energija sačuvana (tj. E je *konstanta gibanja* jer se ne mijenja s vremenom, $\dot{E} = 0$) i data je izrazom

$$E = -\frac{K}{2a} \tag{5.9}$$

gdje je a velika poluos elipse.

U najstarijem slučaju Keplerovog problema, naime onog planetarnog gibanja, sila je gravitaciono privlačenje između dvije mase m_1 i m_2. U tom bi slučaju bilo $K = Gm_1m_2$ ($G \approx 6.673 \cdot 10^{-11}\mathrm{Nm^2/kg^2}$).

U problemu koji sada razmatramo, sila (5.6) je Coulombova, između elektrona naboja $-e$ i jezgre naboja $+Ze$. Zato je tu pokrata $K = \mathrm{k_c}Ze^2$, gdje konstanta proporcionalnosti $\mathrm{k_c}$ ovisi o sustavu jedinica. Na primjer, $\mathrm{k_c} = 1$ za gaussovski (cgs) sustav jedinica, odnosno $\mathrm{k_c} = 1/4\pi\epsilon_0 \approx 8.988 \cdot 10^9\mathrm{Nm^2/C^2}$

za SI sustav. Još jedan zgodan način zapisa je $K = Z\,\alpha\,\hbar\,c$, dakle preko takozvane konstante fine strukture elektrodinamike α,

$$\alpha \equiv \mathrm{k_c}\,\frac{e^2}{\hbar\,c} \approx \frac{1}{137.036}\,, \tag{5.10}$$

koja je bezdimenzionalna, pa u svakom sustavu jedinica ima jednaku vrijednost. Tu smo uveli zgodnu pokratu $\hbar \equiv h/2\pi$, tzv. "reduciranu Planckovu konstantu", koja i u mnogo drugih slučajeva skraćuje pisanje formula.

Kasnije ćemo pokazati da je *za određeni iznos impulsa vrtnje* L, energija E minimalna upravo za specijalni slučaj gibanja po *kružnici*. Naravno, spomenuta rješenja Keplerovog problema kažu i da *ista ta energija* može odgovarati i gibanju čestice po elipsi proizvoljnog ekscentriciteta, čim je velika poluos te elipse jednaka radijusu spomenute kružnice [vidi izraz (5.9)]. Međutim, to se događa za neki manji impuls vrtnje $L' < L$. Što je impuls vrtnje L' manji, ekscentricitet elipse je veći. Drugim riječima, limes nultog ekscentriciteta elipse odgovara donjoj granici izraza (5.7).

Osnovno, apsolutno stabilno stanje atoma iz prvog Bohrovog postulata je upravo stanje *najmanje moguće energije* pa barem ono sigurno ima kružnu putanju (*ako* $L \neq 0$, što se i pretpostavlja u planetarnom modelu). Zato su kružne orbite od posebnog fizikalnog interesa.

Ako se ograničimo na specijalni slučaj kružnih putanja, analiza gibanja postaje laka. Na kružnici je r konstantan, $\dot{r} = 0 = \ddot{r}$, pa kod gibanja po kružnici radijalna sila (5.6) uzrokuje samo centripetalnu akceleraciju $-v^2/r$ poznatu iz elementarnog problema jednolikog kružnog gibanja:

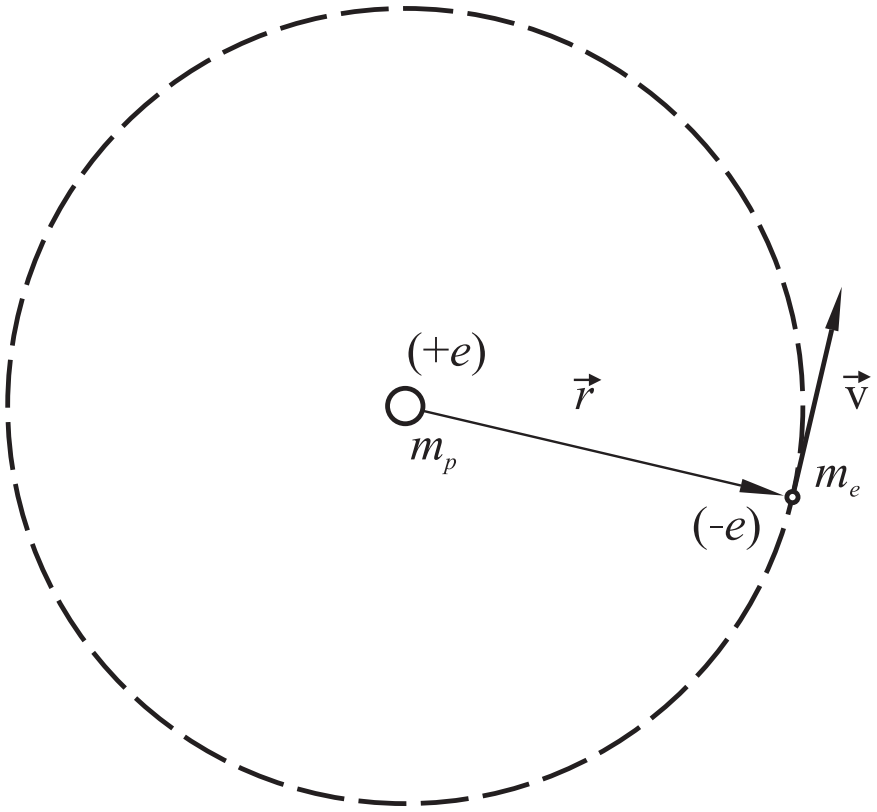
$$m\,a_r = -\frac{mv^2}{r} = -\frac{K}{r^2} = F_r(r)\,. \tag{5.11}$$

Odatle slijede konstantna kinetička energija T i konstantna veličina brzine v:

$$T = \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2}\,\frac{K}{r}\,, \qquad v = \sqrt{\frac{K}{m\,r}}\,. \tag{5.12}$$

Potencijalna energija $V(r)$ koja odgovara sili (5.6) je

$$V(r) = \int_r^\infty F_r(r)\,dr = -\,\frac{K}{r}\,, \tag{5.13}$$



Slika 5.2:
Slučaj kružnih staza u Bohr-Rutherfordovom modelu atoma vodika ($Z = 1$) znači da se elektron mase m_e i naboja $-e$ giba brzinom konstantne veličine $v = \sqrt{\mathrm{k_c}\, e^2/m_e\, r}$ na konstantnoj udaljenosti r od protona naboja $+e$ i mase m_p. U prvoj aproksimaciji, zbog $m_p >> m_e$, možemo uzeti da se samo elektron giba oko protona koji miruje. Tu aproksimaciju lako uklonimo uvođenjem reducirane mase (5.31).
Kada se implementira kvantni uvjet (5.20) da u stacionarnim stanjima vodikovog atoma, razni radijusi orbite elektrona mogu biti samo $r_n = n^2\, a_0$, vidimo da za svaki n njima odgovaraju konzistentno nerelativističke brzine $v_n = \sqrt{\alpha\, \hbar\, c/m_e\, a_0}\, /n \, = \, c\, \alpha/n$.

pa kinetička energija za jednoliko gibanje po kružnici (5.12) uvijek iznosi $-\frac{1}{2}$ potencijalne energije,

$$T \,=\, -\,\frac{1}{2}\,V(r)\,. \tag{5.14}$$

Ukupna energija elektrona mase $m = m_e$ je

$$E = T + V = \frac{m_e v^2}{2} - \frac{K}{r}\,. \tag{5.15}$$

Ona je za vezanu česticu negativna jer odabrana referentna nula energije odgovara mirnoj, beskonačno udaljenoj čestici: $v = 0$, $r = \infty$.

Ukupna energija (5.15) u slučaju gibanja po kružnici zbog (5.14) postaje

$$E_{\rm circ} \,=\, \frac{1}{2}\,V(r) = -\frac{1}{2}\,\frac{K}{r} \,=\, -\,\frac{1}{2}\,\mathrm{k_c}\,\frac{Ze^2}{r}\ , \tag{5.16}$$

a to možemo vidjeti i kao specijalni slučaj općenitijeg izraza (5.9), gdje u slučaju gibanja po kružnici uvrštavamo $a = r$.

(Odavde nadalje ćemo izlaganje specijalizirati isključivo na vodik, t.j. na $Z = 1$, a implikacije općenitog atomskog broja Z na kvantizirane radijuse i energije dajemo u zadacima 5.3. i 5.4.)

Kako je za datu silu (interakciju) (5.6) K nepromjenjiva prirodna konstanta, jednadžba (5.16) pokazuje da **za jednoliko kružno gibanje, energija čestice ovisi samo o radijusu staze**.

Diskretne vrijednosti energijâ stacionarnih stanjâ, E_n, koje su nam potrebne da objasnimo Balmerovu formulu [vidi postulat **II** i jednadžbu (5.5)], impliciraju kroz jednadžbu (5.16) i diskretne vrijednosti radijusa odgovarajućih stacionarnih orbita. Kvantizacija jedne veličine, dakle njena restrikcija na određene dozvoljene vrijednosti, povlači kvantizaciju druge. Zato uz energije E_n označimo i odgovarajuće radijuse r_n cijelim brojevima $n = 1, 2, 3, ...$ Dakle, energije stacionarnih stanja, E_n, su naprosto $E_{\rm circ}$ (5.16) uz $r = r_n$. Najnižu, dakle najnegativniju energiju ima stanje s najmanjim radijusom orbite, dok s rastom r_n energije rastu prema nuli, $E_n \to 0$ za $n \to \infty$.

Po jednadžbi (5.5) iz **II** Bohrovog postulata, prijelazom iz stacionarnog stanja više energije E_n i većeg radijusa r_n u stanje niže energije E_m i manjeg

radijusa r_m oslobodi se kvant energije

$$E_{mn} \,=\, h\nu_{mn} \,=\, h\,\frac{c}{\lambda_{mn}} \,=\, E_n - E_m \,=\, \frac{\mathrm{k_c}\,e^2}{2}\left(\frac{1}{r_m}-\frac{1}{r_n}\right). \tag{5.17}$$

elektromagnetskim zračenjem frekvencije ν_{mn} odnosno valne duljine λ_{mn}. Isto tako, apsorpcijom zračenja frekvencije ν_{mn} događaju se prijelazi u stanja više energije. Na primjer, vodikov atom u osnovnom stanju ($m = 1$) doživljava ionizaciju apsorpcijom energije E_{ioniz} koja iznosi najmanje $-E_1$, jer toliko treba da se elektron udalji do beskonačnog radijusa i tamo miruje, $E_{\mathrm{ioniz}} \geq E_\infty - E_1 = -E_1 \equiv \mathbb{R}$. Eksperimentalno, najmanja energija potrebna za ionizaciju atoma vodika u osnovnom stanju iznosi $\mathbb{R} = 13.6\ \mathrm{eV}$. Zbog $E_1 = -\mathrm{k_c}\,e^2/2r_1$, radijus u osnovnom stanju onda mora biti

$$a_0 \,\equiv\, r_1 \,=\, \frac{\mathrm{k_c}e^2}{2\,\mathbb{R}} \,=\, 0.529\times 10^{-10}\,\mathrm{m} \,\approx\, \frac{1}{2}\,\text{Å}\,. \tag{5.18}$$

Općenito, eksperimentalno precizno izmjerene frekvencije elektromagnetskog zračenja vodikovog atoma (n-ta linija u m-toj seriji) date su generaliziranom Balmerovom formulom u Runge-Rydbergovom obliku (1.3):

$$\nu_{mn} = c\,\mathcal{R}_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{m^2}-\frac{1}{n^2}\right) \quad (\mathcal{R}_{\mathrm{H}} = 1,097\times 10^7\,\mathrm{m}^{-1},\ m,n\in\mathbb{N},\ n>m)\,. \tag{5.19}$$

Niels Bohr je navodno o tome rekao: "Čim su mi pokazali Balmerovu formulu, sve mi je postalo jasno." Očito, konzistentnost teorijskog rezultata (5.17) s eksperimentalnom Balmerovom formulom (5.19) zahtijeva da se pretpostavi, odnosno dodatno postulira **kvantni uvjet** (5.20) koji daje energije stacionarnih stanja E_n u (5.17): radijusi r_n stacionarnih stanja vodikovog atoma su

$$r_n = n^2\,a_0 \qquad (n = 1,2,3,...)\,, \tag{5.20}$$

gdje je tzv. *Bohrov radijus* $r_1 \equiv a_0$ radijus najmanje stacionarne orbite i odgovara osnovnom stanju, dakle stanju najniže moguće energije $E_1 = -\,\mathrm{k_c}\,e^2/2\,a_0$. Izraz (5.16) uz $r = r_n$ i kvantni uvjet (5.20) daju sljedeći općeniti izraz za kvantizirane energije stacionarnih stanja:

$$E_n \,=\, -\,\frac{\mathrm{k_c}\,e^2}{2\,a_0\,n^2} \,=\, \frac{1}{n^2}\,E_1\,. \tag{5.21}$$

Te diskretne dozvoljene energijske razine su dakle objašnjavale spektar vodikovog atoma, pod uvjetom da je Bohrov radijus s eksperimentalno određenom Rydbergovom konstantom $\mathcal{R}_{\mathrm{H}}$ iz Balmerovih formula (5.19) povezan ovako:

$$a_0 = \frac{\mathrm{k_c}\, e^2}{2\, h\, c\, \mathcal{R}_{\mathrm{H}}} \tag{5.22}$$

Uvrštavanjem $\mathcal{R}_{\mathrm{H}}$ iz (5.19) dobivamo opet $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}\,\mathrm{m}$, kao u (5.18).

Međutim, Bohrov model postiže i mnogo više: on može teorijski *objasniti* izmjerenu Rydbergovu konstantu $\mathcal{R}_{\mathrm{H}}$, jer primjenom *principa korespondencije* na frekvencije emitiranog zračenja, daje teorijsku predikciju za Bohrov radijus a_0. I to ovako: iz jednadžbe (5.17) i kvantnog uvjeta (5.20), energija emitirana prijelazom iz stanja $n+1$ u stanje n je

$$h\nu = E_{n+1} - E_n = \frac{\mathrm{k_c}\, e^2}{2} \left(\frac{1}{n^2\, a_0} - \frac{1}{(n+1)^2\, a_0} \right) = \frac{\mathrm{k_c}\, e^2}{2\, a_0}\, \frac{2n+1}{n^2\,(n+1)^2}\,, \tag{5.23}$$

pa je odgovarajuća frekvencija u limesu *vrlo visokog* kvantnog broja n približno

$$\nu \approx \frac{\mathrm{k_c}\, e^2}{2\, h\, a_0}\, \frac{2}{n^3}\,. \tag{5.24}$$

Predikcija klasične elektrodinamike za ovakav sustav (vidi Sliku 5.2) je da je frekvencija emitiranog zračenja jednaka orbitalnoj frekvenciji elektrona. Period τ potreban za jedan obilazak kružne orbite radijusa r je $\tau = 2\pi r/v$, pa je klasična frekvencija

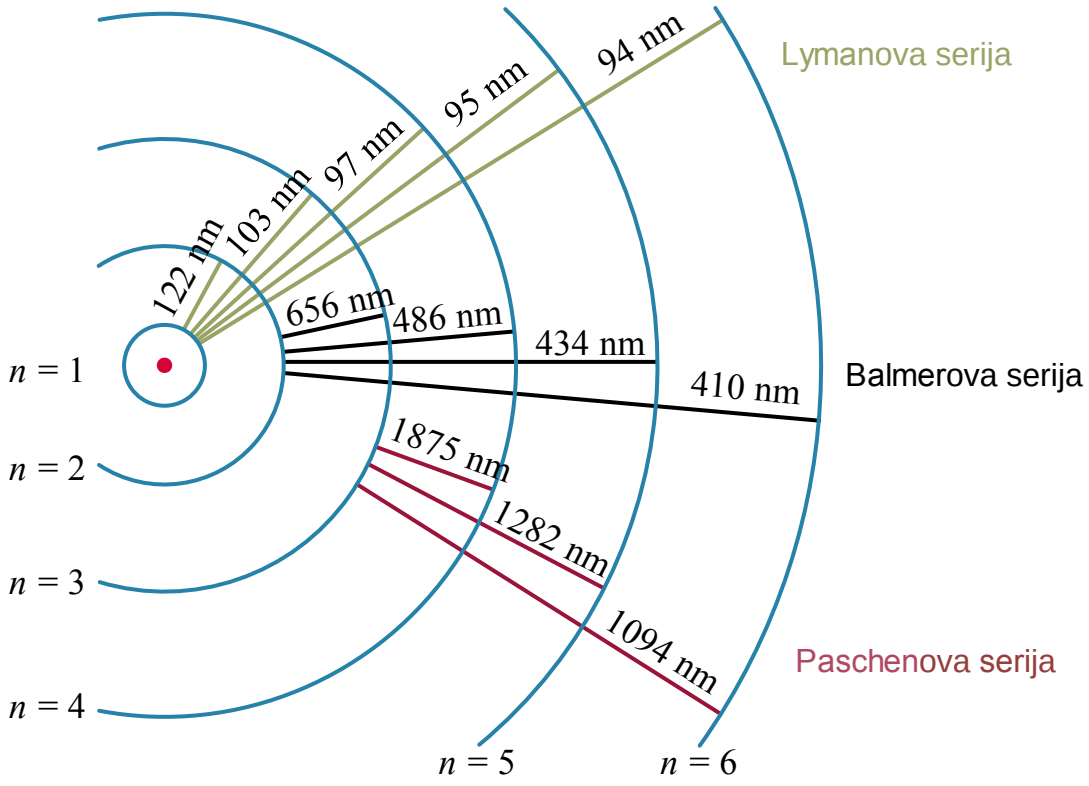
$$\nu_{\mathrm{klas}} = \frac{1}{\tau} = \frac{v}{2\pi r} = \frac{1}{2\pi r} \sqrt{\frac{\mathrm{k_c}\, e^2}{m_e\, r}} \tag{5.25}$$

zbog brzine v (5.12) koju implicira uvjet kruženja (5.11).

Budući da je za veliki n

$$\frac{r_{n+1}}{r_n} = \frac{(n+1)^2\, a_0}{n^2\, a_0} \approx 1\,, \tag{5.26}$$

Slika 5.3:
Poopćenu Balmerovu formulu (5.19) i njene uspjehe teorijski objašnjavamo zahvaljujući točnim diskretnim energijskim razinama E_n (5.29) elektrona vezanog u atomu vodika. U izvornom Bohrovom modelu atoma vodika, svaka energija E_n odgovara samo kružnoj stazi radijusa $r_n = n^2\, a_0$. (A u Sommerfeldovom poopćenju, još i elipsama velike poluosi $a = r_n$ i dodatnih $n-1$ mogućih malih poluosi b određenima formulom (5.42) – usporedi sa Slikom 5.5.) Izvor: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Hydrogen_transitions.svg, uz prevedene nazive serijâ.



relativna promjena radijusa je mala, pa možemo odabrati $r = r_n = n^2\, a_0$. Dakle, klasična predikcija za frekvenciju u našoj situaciji je

$$\nu_{\text{klas}} = \frac{1}{2\pi\, n^3} \sqrt{\frac{\mathrm{k_c}\, e^2}{m_e\, a_0^3}}\,. \tag{5.27}$$

Princip korespondencije zahtjeva da se kvantni rezultati u limesu velikih kvantnih brojeva moraju složiti s klasičnim rezultatima. Tako i za frekvencije (5.24) i (5.27) mora vrijediti $\nu = \nu_{\text{klas}}$. Odatle slijedi još jedna teorijska predikcija za Bohrov radijus, ali primijetite razliku u odnosu na njegovo određivanje u (5.18) ili iza (5.22), gdje njegova vrijednost slijedi iz zahtjeva da namjesti ("fita") empiričku energiju ionizacije ili spektralne linije. No sada iz principa korespondencije slijedi predikcija (5.28), koja Bohrov radijus daje preko fundamentalnih fizikalnih veličina, naime mase i naboja elektrona, m_e i e, te Planckove konstante h:

$$a_0 = \frac{h^2}{(2\pi)^2\, \mathrm{k_c}\, e^2\, m_e} = \frac{1}{\mathrm{k_c}}\, \frac{\hbar^2}{m_e\, e^2} = \frac{1}{\alpha}\, \frac{\hbar}{m_e\, c} = \frac{\lambda\!\!\!^{-}_C}{\alpha} = 0.529 \times 10^{-10}\,\mathrm{m}\,. \tag{5.28}$$

(Ovo su dobri primjeri kako reducirana Planckova konstanta $\hbar \equiv h/2\pi$ i bezdimenzionalna konstanta α (5.10) omogućuju kompaktnije zapise formula.)

Preko (5.28), ili pak još dodatnim skraćivanjem pomoću konstante α (5.10), diskretne energijske razine vodikovog atoma (5.21) postaju

$$E_n = -\frac{1}{n^2}\, \frac{\mathrm{k_c^2}\, e^4\, m_e}{2\,\hbar^2} = -\frac{\alpha^2\, m_e c^2}{2\, n^2} \equiv -\frac{\mathbb{R}}{n^2}\,. \tag{5.29}$$

Ove rezultate za energije i odgovarajuće radijuse vodika generaliziramo u Zadacima 5 na slučaj proizvoljnog atomskog broja Z.

Važno je uočiti da nezavisno određen Bohrov radijus (5.28) omogućuje da obrnemo raniji postupak iz (5.18)–(5.22): preko (5.22) dolazimo do predikcije za spektroskopsku Rydbergovu konstantu vodika $\mathcal{R}_{\mathrm{H}}$ a time i do predikcijā za spektar vodika (uključujući energiju ionizacije $\mathbb{R}$), koje se slažu s eksperimentalno izmjerenim spektrima. To je uvjerilo i Einsteina da "nečeg tu ima", jer teorijski izvod $\mathcal{R}_{\mathrm{H}}$ nije mogao biti samo sretna posljedica modelskog namiještanja.

Pokratu $\mathbb{R}$ nazivamo *Rydberg* (energije), što se ne smije brkati sa spektroskopskom *Rydbergovom konstantom* $\mathcal{R}_{\mathrm{H}}$ iz formula kao (1.2) ili (5.19). Rydberg $\mathbb{R}$ se udomaćio kao zgodna energijska jedinica/skala u atomskoj fizici, jer kao što smo vidjeli iznad (5.18), on odgovara ionizacijskoj energiji vodika, tj. energiji $-E_1$ potrebnoj da se elektron u osnovnom stanju izbaci iz vodikovog atoma:

$$\mathbb{R} \equiv \frac{\mathrm{k_c^2}\, e^4\, m_e}{2\hbar^2} = \frac{\alpha^2\, m_e c^2}{2} = \frac{\mathrm{k_c}\, e^2}{2\, a_0} = -E_1 = 2.18 \times 10^{-18}\,\mathrm{J} = 13.6\,\mathrm{eV}\,. \quad (5.30)$$

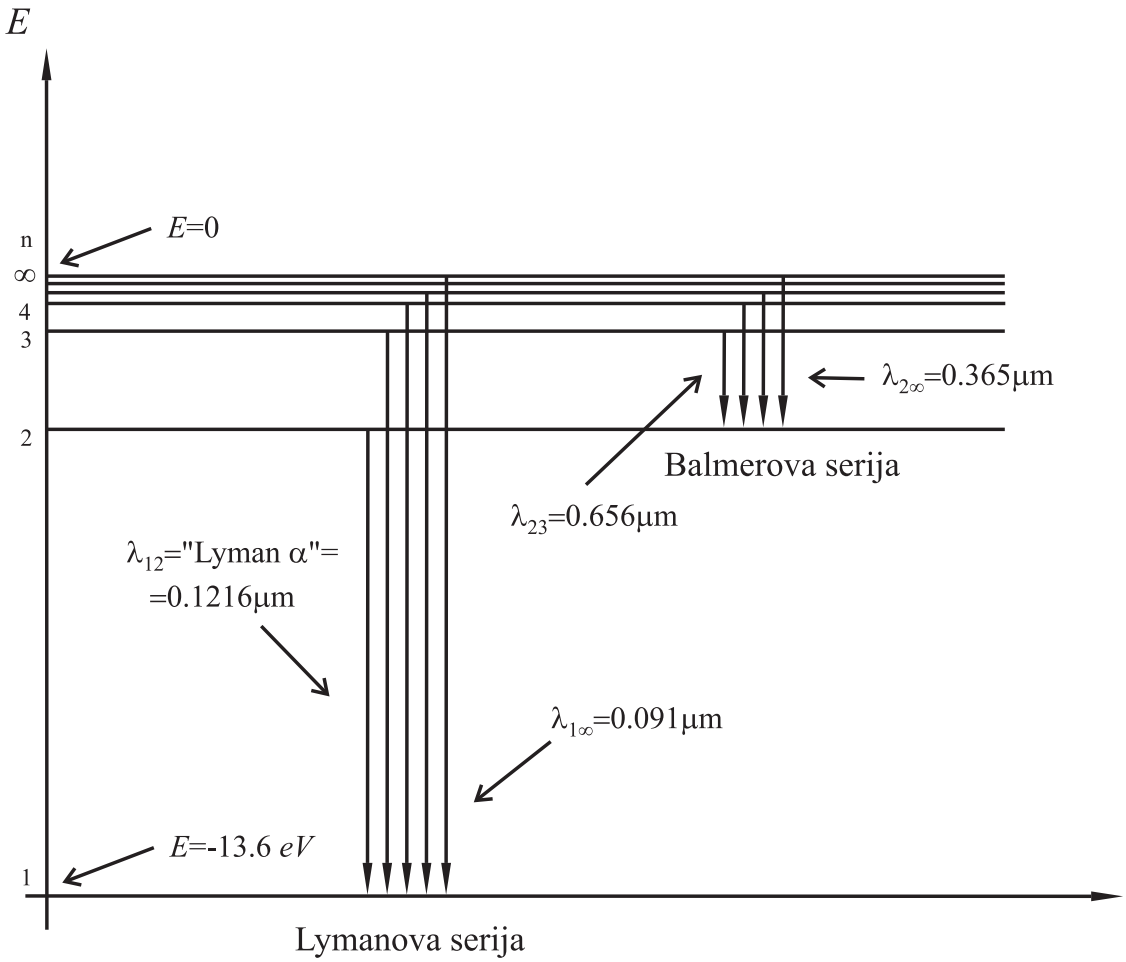
Ta je vrijednost ionizacijske energije eksperimentalno potvrđena.

Slično se kao karakteristična duljina u atomskoj fizici udomaćio *Bohrov radijus* $a_0 \equiv r_1$. Budući da iznosi oko pola Ångströma, Bohrov model daje dobru ocjenu veličine atoma jer je empirički poznato da su one tipično oko jednog Ångströma. Međutim, najveće je oduševljenje Bohrov model izazvao rješenjem zagonetke Balmerove formule, dakle uspješnom teorijskom reprodukcijom cijelog spektra (1.3) atoma vodika. Očito je naime da diskretne energijske razine oblika (5.29) uz drugi Bohrov postulat (5.5) dovode do *istog oblika* za frekvencije odnosno valne duljine spektralnih linija koji ima eksperimentalno dobivena formula (1.3), karakterizirana razlikom inverznih kvadrata cijelih brojeva. Uz to se i vrijednost $\mathbb{R}/c\,h$ vrlo dobro slaže s vrijednošću empiričke Rydbergove konstante $\mathcal{R}_{\mathrm{H}}$, pa kroz (5.17) definitivno imamo teorijsko objašnjenje za vodikov eksperimentalni spektar (5.19).

Slaganje bohrovskih teorijskih vodikovih spektara s empiričkima (1.3) postaje čak izvrsno kada uvažimo da se u problemu dva tijela, s masama m_1 i m_2, oba gibaju oko zajedničkog težišta, dakle kad uklonimo *aproksimaciju* da je jezgra nepomičan centar sile pod čijim se utjecajem elektron giba. Tu je aproksimaciju vrlo lako ukloniti, jer se uvođenjem *reducirane mase* μ problem gibanja dva tijela svodi na gibanje jednog tijela. Naime, po rješenju problema dva tijela, gibanje jednoga s točke gledišta drugoga izgleda kao da je to drugo nepomično, a prvo se oko njega giba kao da ima reduciranu masu

$$\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1}{1 + \frac{m_1}{m_2}} = \frac{m_2}{1 + \frac{m_2}{m_1}}\,. \quad (5.31)$$

Ako su tijela jednake mase, μ je polovica svake od njih. To je na primjer slučaj pozitronija, vezanog stanja elektrona i njegove antičestice – pozitrona.



Slika 5.4:

Shema nastanka prve dvije serije ($m = 1$, Lymanove i $m = 2$, Balmerove) spektralnih linija vodika zbog prelaska elektrona iz n-te u m-tu diskretnu energijsku razinu. Valne duljine λ_{mn} su date u mikrometrima (1 μm $= 10^{-6}$ m).

(Pozitronij je još 1934. godine prvi teorijski predvidio i spektar mu upravo pomoću Bohrovog modela obradio hrvatski fizičar Stjepan Mohorovičić, sin slavnog Andrije Mohorovičića.)

Ako je pak jedno tijelo mnogo teže od drugog, reducirana masa μ je samo malo manja od mase lakšeg tijela. To je slučaj u atomskoj fizici, gdje i najlakša jezgra, ona atoma vodika, naime proton, ima masu m_p gotovo 2000 puta veću od mase elektrona:

$$m_p = 1.672622 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg} = 1836.153\,m_e = 938.272\,\mathrm{MeV/c^2}\,. \tag{5.32}$$

Zato pretpostavka nepomičnog protona unosi netočnosti od samo malo više od pola promila, pa se očito radi o vrlo dobroj aproksimaciji. [Na primjer, uklanjanje te aproksimacije se ne bi vidjelo u *zaokruženim* numeričkim vrijednostima datim u formulama (5.30) i (5.28).] Međutim, spektroskopska mjerenja su dovoljno precizna da registriraju te male netočnosti, te da pokažu *praktički savršeno slaganje s teorijskim spektrom (5.29)* kada se ta aproksimacija ukloni, dakle kad u svim formulama u ovom poglavlju zamijenimo m i m_e reduciranom masom (5.31) $\mu = m_e m_p/(m_e + m_p)$.

Vratimo se sad na teoriju, ponajprije na impuls vrtnje (5.8). Za naš specijalni slučaj gibanja, kada radij-vektor položaja $\boldsymbol{r}(t)$ opisuje kružnicu, linearni impuls $\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$ je okomit na $\boldsymbol{r}$, pa se veličina impulsa vrtnje $L \equiv |\boldsymbol{L}| \equiv |\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}|$ svodi na

$$L = rp = rmv\,, \tag{5.33}$$

pa uočavamo dvije stvari.

Prvo, impuls vrtnje (5.33) i brzina (5.12) određena uvjetom kružnog gibanja (5.11) daju radijus kružnice po kojoj se čestica giba,

$$r_{\mathrm{circ}} = \frac{L^2}{Km}\,, \tag{5.34}$$

pa ukupnu energiju (5.16) u slučaju gibanja po kružnici izražavamo kao

$$E_{\mathrm{circ}} = -\frac{1}{2}\frac{K^2 m}{L^2}\,. \tag{5.35}$$

Taj izraz se poklapa s donjom granicom u uvjetu (5.7). Time smo dokazali našu raniju tvrdnju da je minimum energije za dati impuls vrtnje postignut upravo u specijalnom slučaju kada se čestica giba po kružnici.

Drugo, i mnogo važnije, jest to da sad jasno vidimo da je kvantizacija radijusa ekvivalentna kvantizaciji impulsa vrtnje. Naime, (5.33) i (5.12) daju

$$L = \sqrt{r\, m\, K} = n\, \sqrt{a_0\, m\, K}\,, \quad n = 1, 2, 3, 4, \ldots\,, \tag{5.36}$$

gdje druga jednakost slijedi ako nametnemo uvjet kvantizacije radijusa (5.20).

Kada još uvrstimo Bohrov radijus a_0 (5.28) dobiven pomoću principa korespondencije, nužno dobivamo izraz za kvantizirani impuls vrtnje

$$L = n\, \frac{h}{2\pi} \equiv n\, \hbar\,, \quad n = 1, 2, 3, 4, \ldots\,. \quad \text{(Što je zapravo \textbf{pogrešno!})} \tag{5.37}$$

Obično se *ta* relacija **postulira kao uvjet kvantizacije** u kratkim prikazima Bohrovog modela, pa se iz nje izvode diskretne energije (5.29), ali i radijusi (5.20). To je obrnut postupak od izlaganja ovdje, gdje nam kao treći postulat modela služi relacija (5.20) u ulozi uvjeta kvantizacije radijusâ dozvoljenih putanjâ. Dok se vjerovalo u punu ispravnost i daljnji razvoj Bohrovog modela, relacija (5.37) ima prednost kao postulat, jer omogućuje **Sommerfeldovo poopćenje Bohrovog modela s isključivo kružnih putanja na eliptične.**

Ukratko o Sommerfeldovom poopćenju Bohrovog modela*

Sommerfeld je uveo tzv. *azimutalni* kvantni broj n_ϕ koji, u analogiji s relacijom (5.37), određuje diskretne vrijednosti impulsa vrtnje,

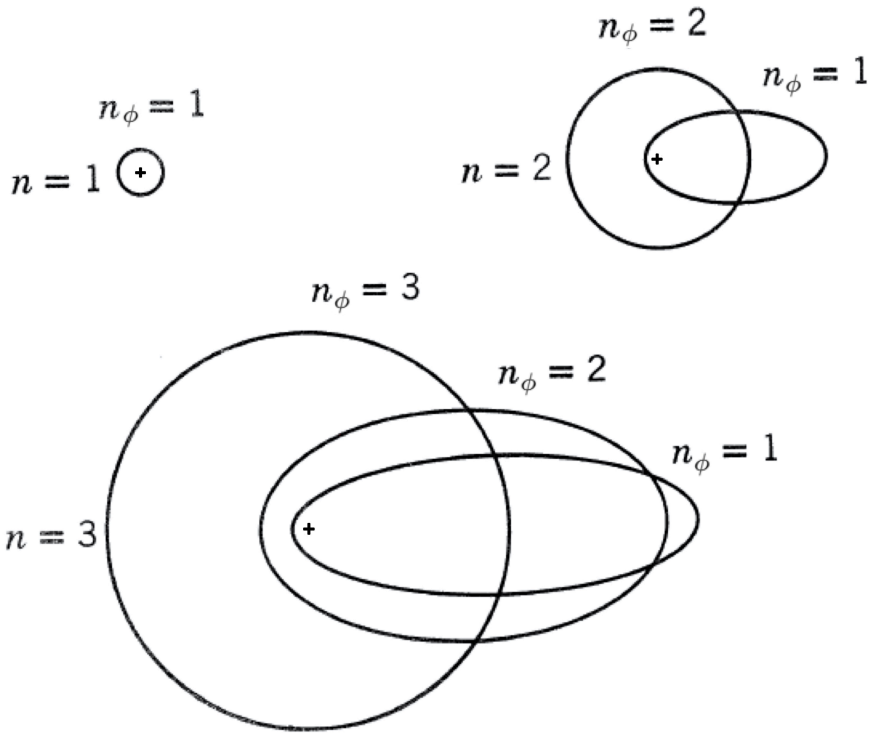
$$L = n_\phi\, \hbar\,, \quad n_\phi = 1, 2, 3, 4, \ldots\,, \tag{5.38}$$

te *radijalni* kvantni broj n_r, koji taj L relacijom

$$L\, \left(\frac{a}{b} - 1 \right) = n_r\, \hbar\,, \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \ldots\,, \tag{5.39}$$

povezuje s omjerom velike i male poluosi elipse, označene s a i b. Tada je (tzv. *glavni*) kvantni broj n, koji određuje diskretne energije (5.29), njihov zbroj:

$$n \equiv n_\phi + n_r\,, \qquad n = 1, 2, 3, 4, \ldots\,. \tag{5.40}$$



Slika 5.5: Prikazane su moguće orbite, do vrijednosti glavnog kvantnog broja $n = 3$, u Sommerfeldovom poopćenju Bohrovog modela. Za svaki n postoji n različitih stazâ, naime n elipsâ koje sve imaju jednaku vrijednost velike poluosi, $a = n^2 a_0$, ali su različitog ekscentriciteta $\epsilon = \sqrt{1 - (b/a)^2}$. U slučaju $n_r = 0$, dakle $n_\phi = n$ i $a = b$, orbita se poklapa s onom iz izvornog Bohrovog modela – s kružnicom radijusa $r_n = n^2 a_0$, tj., s elipsom nultog ekscentriciteta. Zbog (5.42) ovdje imamo $\epsilon = \sqrt{1 - (n_\phi/n)^2}$, pa je orbita to izduženija elipsa što je n_ϕ manje od n, odnosno, što je n_r veće od 0.
Za razliku od kružnih staza (koji slučaj je već ilustriran na Slici 5.2), na elipsama s $\epsilon > 0$ elektron nema konstantan iznos brzine (5.12). Naime, na točkama udaljenijim od izvora privlačne sile (t.j. pozitivno nabijene jezgre), potencijalna energija je očito veća nego na bližim točkama, pa je s kinetičkom energijom obratno, zbog $E = T + V = const.$ Jezgra se nalazi u zajedničkom fokusu prikazanih elipsi. On je na ovoj slici označen križićem i nalazi se na udaljenosti $f = a\,\epsilon = \sqrt{a^2 - b^2} = a_0\, n^2\, \epsilon$ od središta elipse.

Za dati n, azimutalni i radijalni kvantni broj mogu imati ove respektivne vrijednosti:

$n_\phi = 1,\, 2,\, 3,\, \ldots, n\,.$ $\qquad$ $n_r = n{-}1,\, n{-}2,\, n{-}3,\, \ldots,\, 0\,.Omjervelikeimalepoluosielipse,$

a/b, $datjeomjeromazimutalnogiglavnogkvantnogbroja : \frac{a}{b} = \frac{n}{n_\phi}\,.$(5.42)Za $n_r = 0$, tj. $n_\phi = n$, elipsa postaje kružnica radijusa a, i sve se svodi na ono što smo već detaljno razmatrali.

Iz rješenja Keplerovog problema je poznato da je energija gibanja čestice po kružnici jednaka energiji gibanja po elipsi (5.9) proizvoljnog ekscentriciteta, čim je velika poluos te elipse jednaka radijusu spomenute kružnice. Prema tome, i kod eliptičkog gibanja uz kvantne uvjete (5.38) i (5.39), dozvoljene diskretene energije su određjene glavnim kvantnim brojem n preko formule (5.29), izvedene za gibanje po kružnici. Iz istog je razloga velika poluos a u svakom kvantnom stanju koje ima glavni kvantni broj n, jednaka n-tom Bohrovom radijusu (5.20), (5.28):

$$a \,=\, r_n \,=\, n^2\, a_0 \,=\, \frac{n^2}{\mathrm{k_c}}\,\frac{\hbar^2}{m_e\, e^2} \,=\, \frac{n^2}{\alpha}\,\frac{\hbar}{m_e\, c} \,=\, \frac{n^2}{2\pi}\,\frac{\lambda_C}{\alpha}\,. \qquad (5.43)$$

(Profinjenje opisa prelaskom na reduciranu masu, $m_e \to \mu$, može se provesti na već opisani način.)

Slijedi da u Sommerfeldovom poopćenju Bohrovog modela, za svaku dozvoljenu energiju E_n (5.29), tj. za svaku vrijednost glavnog kvantnog broja n, postoji n dozvoljenih putanjâ. Ona s $n_r = 0$, tj. $n_\phi = n_\phi^{max} = n$, kružna je staza razmatrana u originalnom Bohrovom modelu, te ima maksimalni impuls vrtnje $L^{max} = n\,\hbar$. Ostale dozvoljene putanje, sa $n_r = 1, 2, ..., n-1$, su elipse sve većeg ekscentriciteta $\sqrt{1 - b^2/a^2} = \sqrt{1 - n_\phi^2/n^2}$. Sve dok je glavni kvantni broj n isti, energija je ista, iako su moguće putanje vrlo različite. Kažemo da su takva kvantna stanja energijski *degenerirana*.

Drugi razlog da se relacija (5.37) najčešće postulira kao uvjet kvantizacije jest to što se, krećući od nje, najlakše dođe do diskretnih energija (5.29) i vodikovog spektra (5.19), jer (5.37) preko uvjeta kruženja (5.11) odmah daje uvjet kvantizacije radijusa (5.20) koji u sebi već sadrži i izraz za osnovni Bohrov radijus a_0 (5.28). To je zato jer je oboje ugrađeno u (5.37), kako smo upravo pokazali.

Mi nismo postulirali relaciju (5.37) jer, kao prvo, nije nam bio cilj dobiti kvantizirane radijuse (5.20), (5.28) i energije (5.29) kao čudom. Upravo obratno, htjeli smo pokazati kako to da se ova mješavina kvantnih i klasičnih ideja mogla podesiti da dade empiričke spektralne linije (5.19) odnosno energije potrebne za njih, te kakvu ulogu tu igra princip korespondencije iz kojeg smo dobili ključnu skalu a_0 (5.28).

Kao drugo, kad se kvantna teorija razvila do stupnja Schrödingerove jednadžbe, njena rješenja su jasno pokazala da je relacija (5.37) **pogrešna**, što su kasnije potvrdili i eksperimenti. [Isto su tako pogrešna i Sommerfeldova poopćenja počevši od (5.38)-(5.39).] Zapravo, unatoč empiričkim upjesima, još puno toga se u Bohrovom modelu pokazalo pogrešnim, samo se to kod relacije (5.37) najlakše vidi. Zato ćemo detaljnije prodiskutirati koji je zapravo status Bohrovog modela u razvoju kvantne teorije.

5.3 Status Bohrovog modela u razvoju kvantne teorije

Spektar vodika je dugo bio neobjašnjiv, pa su gore opisani uspjesi Bohrovog modela izazvali oduševljenje i mnogo šire prihvaćanje kvantnih ideja nego do tada. Osobito su se proslavile ideje diskretnih energijskih nivoa u atomima, ali i Bohrova slika elektronskih putanja. Neko se vrijeme činilo da se kod Bohrovog modela atoma ne radi samo o modelu atomske strukture s nekim elementima kvantne fizike, nego o fundamentalnoj kvantnoj teoriji, pa je on postao osnova takozvane **stare kvantne teorije**. Ipak, kasniji razvoj je to demantirao na paradoksalan način. Zabilježeni su još neki njeni uspjesi, kao na pr. Sommerfeldovo uključenje relativističkih efekata u atomu vodika tako što je uz kružne razmatrao i eliptične orbite iste energije. Tu su bili i neuspjesi kod sustavâ s više elektrona; na primjer, već kod sljedećeg najjednostavnijeg atoma, helija, ta stara kvantna teorija je bila nemoćna. Ipak su se nastavljali pokušaji da se objasni što to stoji iza uspjehâ Bohrovih postulata, "recepata" za vodik. Konačno je de Broglie postavio hipotezu da se valno–čestična dualnost ne odnosi samo na fotone, nego na sve mikročestice. Dakle, i elektronu bi se pripisala valna svojstva. Već ćemo u sljedećem poglavlju vidjeti da to na neki način objašnjava Bohrove uvjete

kvantizacije. To je pobudilo veliku pozornost i potaklo Schrödingera da postavi i riješi valnu jednadžbu za elektron u vodikovom atomu. Ovo zadnje je (uz Heisenbergovu "matričnu mehaniku") bilo ključno za formuliranje **moderne kvantne mehanike**. Schrödingerovo rješenje je dakle ono što u ovoj knjizi podrazumijevamo pod modernim kvantnomehaničkim (nerelativističkim) rješenjem vodikova atoma. Njegovu ispravnost potvrđuju eksperimenti glede svake ispitivane fizikalne veličine, bila u pitanju energija, impuls vrtnje ili bilo što drugo. To rješenje daje potpuno *iste* kvantizirane energije (5.29) kao i Bohrov model, ali ga, paradoksalno, ipak opovrgava. Naime, moderni kvantnomehanički račun pokazuje da je Bohrova slika elektronskih putanja netočna, a sâm kvantni uvjet (5.37) još je netočniji. Na primjer, u osnovnom stanju vodikovog atoma (gdje $n = 1$) orbitalni impuls vrtnje uopće **nije** dat s $L_1 = 1\hbar$, nego mu je iznos *nula*! Dakle, iako su energije E_n ispravno date glavnim kvantnim brojem n, pridjeljivanje vrijednosti impulsa vrtnje tim stacionarnim stanjima određene energije je pogrešno.

Naravno, ključno je da *i eksperiment to potvrđuje*. Zaista, postoje mnogi dokazi [31] koji proizilaze iz, na primjer, mjerenja atomskih spektara, da je u osnovnom stanju atoma impuls vrtnje elektrona jednak nuli, $L_1 = 0$. (To ne vrijedi za tzv. *spin*, koji je nešto drugo jer se odnosi na "intrinzičnu vrtnju" elektrona (o čemu ćemo pri kraju knjige), ali vrijedi za ovaj "obični" *orbitalni* impuls vrtnje $\boldsymbol{L}$, koji čestica ima zbog svog kretanja, orbitiranja po prostoru.) Općenitije, za svaku energiju E_n (5.29) (odnosno za svaku vrijednost glavnog kvantnog broja n) eksperiment nalazi n mogućih iznosâ impulsa vrtnje L, ali **ne** u skladu sa Sommerfeldovim formulama (5.38) i (5.42). Najočitija razlika je da te vrijednosti **ne** počinju od najmanje vrijednosti $L = 1\,\hbar$, nego je najmanja vrijednost $L = 0$, $\forall\, n$, kao i u slučaju osnovnog stanja.

Pogrešno pridjeljivanje vrijednosti impulsa vrtnje stacionarnim stanjima određene energije će nam poslužiti kao primjer kako oštro određene putanje čestica, iako su suština i bît klasične mehanike, vode na kontradikcije u području kvantne fizike.

Model koji uključuje putanju s $L = 0$: Coulombov oscilator*

Doduše, pogrešno pripisivanje iznosa impulsa vrtnje (5.37) u Bohrovom modelu, odnosno (5.38) u Sommerfeldovom poopćenju, moglo bi se ispraviti pomoću Bucherove [33] modifikacije tih modela, ali, vidjet ćemo – ne na konzistentan i zadovoljavajući način. Najvažnija njegova modifikacija je dodavanje putanje s $L = 0$, i ovdje će nam biti dovoljno da razmotrimo samo nju.

Moramo primijetiti da dodavanje staze s $L = 0$ ide uz izbacivanje kružne staze (dakle, elipse nultog ekscentriciteta) jer ona, zbog $n = n_\phi$, ima najveći impuls vrtnje (5.38) za datu energiju. Da se nikako ne može dobiti $L = 0$ ako bi se dozvolila kružna putanja, najočitije je u osnovnom stanju gdje imamo samo jednu putanju, jer po (5.38) i (5.42), $\{n = 1 = n_\phi,\, n_r = 0\}$ predstavlja jedinu mogućnost. Zato Bucher kružnu stazu zamjenjuje onom klasičnom stazom za koju impuls vrtnje $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} = \boldsymbol{0}$, jer su $\boldsymbol{r}$ i $\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$ kolinearni. Dakle, staza je ravna linija koja prolazi kroz jezgru, odnosno kroz ishodište/centar Coulombovog potencijala. Takva orbita nije razmatrana u astronomskoj verziji Keplerovog problema, jer planet ne može proći kroz Sunce. Međutim, to nije opravdan razlog da se odmah u startu isključi mogućnost da elektron prođe kroz pozitivan naboj jezgre. (Kod Rutherfordovog raspršenja razmatrali smo čak prolazak pozitivnog naboja kroz pozitivnu jezgru.)

Radi uklapanja u skup ostalih orbita s $L \neq 0$, koje su elipse, tu pravocrtnu orbitu s $L = 0$ formalno možemo gledati kao potpuno zgnječenu elipsu, s malom poluosi $b \equiv 0$. Koordinatni sustav je pogodno odabrati tako da to pravocrtno gibanje ide duž jedne od koordinatnih osi, konkretno z. Stanje elektrona koji se u vodikovom ili vodikastom atomu tako giba možemo zvati i *Coulombovim oscilatorom*, jer se od jedne do druge točke okreta $z = \pm\, z^{\text{okr}}$ kreće pod utjecajem Coulombove sile kroz središte Coulombovog potencijala u $z = 0$.

Bucher [33] koristi **nerelativističku kinematiku**, tako da elektron u stanju s $L = 0$ ima ukupnu energiju

$$E \,=\, T \,+\, V \,=\, \frac{m_e v^2}{2} \,-\, \mathrm{k_c}\, \frac{Ze^2}{|z|} \,=\, -\,\mathrm{k_c}\, \frac{Ze^2}{z^{\text{okr}}}\,. \tag{5.44}$$

Ta energija poprima ispravne vrijednosti E_n (5.57) ako je, $\forall\, n$, udaljenost točaka okreta s osnovnim Bohrovim radijusom $r_1 \equiv a_0/Z$ povezana ovako [33]:

$$z_n^{\text{okr}} \,=\, 2\, \frac{a_0}{Z}\, n^2\,. \tag{5.45}$$

Ovdje već možemo ukazati na izvjesnu nekonzistentnost Bucherovog modela. Iz (5.44) slijedi da je u stanju s $L = 0$, brzina duž z-osi

$$v_n \;=\; \pm\, e \sqrt{\mathrm{k_c}\,\frac{2Z}{m_e}}\,\sqrt{\frac{1}{|z|} - \frac{1}{z_n^{\mathrm{okr}}}}\;. \tag{5.46}$$

To vrijedi $\forall\, n$. No razne vrijednosti n utječu samo na z_n^{okr}. Njegov član $-1/z_n^{\mathrm{okr}}$ je važan samo kad nije $|z| << z_n^{\mathrm{okr}}$, dok je problematično upravo područje malenog $|z|$, tj. u blizini ishodišta, gdje Coulombov potencijal ima singularitet $1/|z|$ koji se prenio i u v_n (5.46). Doduše, samo formalno: beskonačnu brzinu, tj. $v \to \pm\infty$ kada $|z| \to 0$, možemo izbjeći tako da se pozovemo na realnu fizikalnu situaciju koju smo već upoznali kod Rutherfordovog raspršenja: pozitivan naboj zapravo nije točkast, nego razmazan u jezgri radijusa $R \sim 10^{-14}$ m. Čak i u slučaju najmanje jezgre, a to je proton u slučaju običnog vodika, radijus R nije bitno manji od oko 10^{-15} m.

Međutim, lako se vidi (Zadatak 5.7.) da na $L = 0$, pravocrtnoj putanji, već na $z \sim 0.5 \times 10^{-13}$ m (što je udaljenost od oko tisućnine Bohrovog radijusa, ali još uvijek znatno veća i od teških jezgara), brzina (5.46) dostiže vrijednosti $v_n \approx 45\sqrt{Z}\alpha\, c \approx 0.3\sqrt{Z}\, c$. (Čak i za atom vodika, gdje $Z = 1$, to je već red veličine brzine svjetlosti c, dok za usporedbu, u Bohrovom modelu $v_n = c\,\alpha/n << c$ – vidi opis Slike 5.2.)

Unatoč tome, Bucher svoj model atoma formulira [33] u okviru nerelativističke kinematike. Zbog te kontradikcije već u samoj formulaciji, on se ne može prihvatiti kao dokaz da koncept oštro određenih orbitâ ne stvara probleme u opisu mikro-objekata kao što su atomi.

Bohrov model, nasuprot Bucherovom, ne pati od gore izloženih problema nego je bar formuliran konzistentno nerelativistički, a njegovo Bohr-Sommerfeldovo poopćenje se štoviše može dodatno poopćiti i u smislu relativističke kinematike. Zato ćemo Bohrov (odnosno Bohr-Sommerfeldov) model upotrijebiti za ilustraciju kako oštro određene klasične putanje (kakve su i njegove, iako uz dodatne Bohr-Sommerfeldove kvantne uvjete) vode na proturiječja u opisu atoma, tj. u području kvantne fizike. To nam ukazuje da prava kvantna teorija mora izgledati drugačije.

Nekoliko poglavlja kasnije, izložit ćemo kako za atom vodika moderni kvantnomehanički opis (potvrđen eksperimentom) zaista pokazuje da za općeniti

glavni kvantni broj n, iznos impulsa vrtnje L zapravo može imati n diskretnih vrijednosti, od kojih je najmanja nula, a najveća je data formulom

$$L^{max} = \sqrt{n(n-1)}\,\hbar\,. \tag{5.47}$$

To je uvijek manje od vrijednosti $n\,\hbar$ koju za L zahtijeva Bohrov model u relaciji (5.37). Tek u limesu vrlo velikih kvantnih brojeva, tj. približenjem klasičnoj granici, maksimalni iznos impulsa vrtnje (5.47) teži u relaciju (5.37) zbog $n >> 1$.

To dovodi do naizgled nerješive kontradikcije, jer relacija (5.37) nužno sljedi iz gibanja po orbitama Bohrovih radijusa (5.20), (5.28), pa ako je ona pogrešna, nije moguće da se elektron giba po tim putanjama. Ali, to su jedine putanje koje daju ispravne kvantizirane energije (5.29). [Rekli smo dovoljno o Sommerfeldovom poopćenju na eliptične orbite da bi bilo jasno da ono ne daje izlaz iz tog proturiječja. Naime, iako to poopćenje omogućuje više diskretnih vrijednosti L za istu energiju, to jest za isti glavni kvantni broj n, pokazuje se da te vrijednosti nisu točne. Na primjer, relacije (5.38) i (5.39) su također u neskladu s (5.47), pa su pogrešne su kao i (5.37).] Ipak, zbog dobrih predikcija za energijske razine (5.29), ne možemo olako odbaciti Bohrov model. Jer, kako je istakao Einstein, *nečeg* tu ima, inače teško da bi se dobila još i savršeno točna teorijska predikcija $\mathbb{R}/c\,h = \mathcal{R}_{\rm H}$ za precizno izmjerenu Rydbergovu spektroskopsku konstantu.

Izlaz iz kontradiktorne situacije daje tek *napuštanje* (kod opisa kvantnih mikro-objekata) takvih *oštro određenih putanja* kao što su keplerovske orbite kakve se pretpostavljaju u Bohrovom modelu i Sommerfeldovom poopćenju istoga. Naravno, ne samo tamo; općenito se u klasičnoj mehanici računaju takve točno određene putanje rješavanjem klasičnih jednadžbi gibanja, ako su poznati početni uvjeti u određenom času. Na primjer, određenu klasičnu putanju $\boldsymbol{r}(t)$ materijalne točke mase m na koju djeluje neka sila $\boldsymbol{F}(t)$, možemo dobiti rješavanjem Newtonove jednadžbe

$$\boldsymbol{F}(t) \;=\; m\,\boldsymbol{a}(t) \;=\; m\;\frac{d^2\,\boldsymbol{r}}{d\,t^2}(t)\;, \tag{5.48}$$

ako znamo položaj $\boldsymbol{r}(t_0)$ i brzinu $\boldsymbol{v}(t_0) = d\boldsymbol{r}/dt(t_0)$ u početnom času $t = t_0$. (Jedan jednostavan, a važan primjer za to, je klasično rješenje (2.8) za putanju jednodimenzionalnog harmoničkog oscilatora, koje potpuno određuje položaj $x(t)$ i brzinu $\dot{x}(t) \equiv dx/dt(t)$ u svakom času t ako su poznati $x(t_0)$

i $\dot{x}(t_0)$ u nekom času $t = t_0$. Nasuprot tome, kao što ćemo vidjeti kasnije, jednadžbe kvantne teorije daju predviđanja samo za vjerojatnosti, iako to na kraju dovodi do vrlo točnih predviđanja za mjerljive fizikalne veličine.)

Da oštro određene putanje nisu potrebne za objašnjenje ispravnih kvantiziranih energija (5.29), uviđamo zahvaljujući tzv. **virijalnom teoremu** [34] koji je *statističke naravi* jer se odnosi na vremenske prosjeke raznih mehaničkih veličina. Za jednu česticu koja se giba pod utjecajem centralne sile koja o radijusu ovisi kao $F(r) \propto r^{\alpha}$ tako da je ovisnost potencijalne energije

$$V(r) = \mathcal{K}\, r^{\alpha+1}\,, \tag{5.49}$$

virijalni teorem daje ovu vezu između prosječne kinetičke energije $\langle T \rangle$ i prosječne potencijalne energije $\langle V \rangle$:

$$\langle T \rangle = \frac{\alpha+1}{2}\,\langle V \rangle\ , \tag{5.50}$$

gdje uglate zagrade $\langle ... \rangle$ označavaju prosjek preko jednog kompletnog perioda gibanja.

U slučaju silâ koje ovise o inverznom kvadratu radijusa, kao gravitacijska ili ovdje relevantna Coulombova sila, imamo $\alpha = -2$, pa slijedi

$$\langle T \rangle \ = \ -\,\frac{1}{2}\,\langle V \rangle\ . \tag{5.51}$$

Ovo je očigledno statistička verzija relacije (5.14), ali za razliku od nje, vrijedi ne samo za gibanje po kružnici, nego vrijedi za bilo kakvo periodičko gibanje čestice zarobljene centralnom silom koja o r ovisi kao $1/r^2$.

Do kvantnog skoka [poput (5.5)] u neko drugo stacionarno stanje, energija stacionarnog stanja se ne mijenja (tj. sačuvana je, E = konstanta), pa $\langle E \rangle = E$. Zato uvijek vrijedi ne samo $E = T + V$, nego i

$$E \ = \ \langle T \rangle + \langle V \rangle \ = \ -\,\langle T \rangle \ = \ \frac{1}{2}\,\langle V \rangle\ . \tag{5.52}$$

Kako je tu potencijalna energija Coulombova [usporedite s jednadžbom (5.16)],

$$E \ = \ \frac{1}{2}\,\langle V \rangle \ = \ -\,\frac{\mathrm{k_c}\, e^2}{2}\ \langle\, \frac{1}{r}\,\rangle\,, \tag{5.53}$$

za reproduciranje točnih energijskih razina (5.29) nije potrebno specificirati neku određenu stazu elektrona, nego je dovoljno da raspodjela položaja elektrona u vodikovom atomu *statistički* bude takva da mu **prosjek** *recipročnog radijusa* u stanju s n-tom dozvoljenom energijom (tj. u n-tom "stacionarnom stanju") iznosi

$$\langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{1}{n^2\, a_0} \qquad (\text{odakle slijedi } E = E_n = -\frac{\mathbb{R}}{n^2}\ )\,. \tag{5.54}$$

Moderni kvantnomehanički račun daje upravo taj rezultat, a ne relaciju (5.20). Doduše, neke sličnosti ima, a i relacija (5.54) potvrđuje da skala a_0 (5.28) ima fundamentalnu ulogu. Što je to, što je u Bohrovom modelu ipak dobro, postaje još jasnije kad se pokaže da rješenja Schrödingerove jednadžbe daju takve raspodjele vjerojatnosti nalaženja elektrona da je u stanjima s maksimalnim impulsom vrtnje (5.47) za dati n, *najvjerojatniji*[†] radijus r dat sa $r_n = n^2\, a_0$, a *prosječni* radijus sa $\langle r \rangle = n^2\, a_0\, [1 + 1/(2\, n)]$. Dakle, u limesu vrlo visokih kvantnih brojeva, tj. vrlo visokih energijâ i vrlo visokih impulsâ vrtnje, relacija (5.20) je dobra barem u smislu prosjeka. Zato je, preko principa korespodencije i relacije (5.25), dovela do ispravnog rezulata (5.28) za skalu a_0.

5.4 Bilanca zastoja pred prekretnicom

Bohrova pretpostavka da je dovoljno klasične fizikalne zakone dopuniti nekim kvantnim uvjetima pokazala se netočnom; odnosno, takva mješavina je imala vrlo ograničenu primjenjivost.

Ipak, višegodišnji rad koji je u velikoj mjeri bio inspiriran i motiviran Bohrovim modelom, konačno je doveo do moderne formulacije kvantne mehanike.

Bohrov se model uspoređuje s krhkim mostom preko provalije koji se raspao čim se preko njega prešlo na tlo moderne kvantne

[†]Podsjetite se što o rješenjima Schrödingerove jednadžbe za vodikov atom kaže vaš udžbenik iz kolegija "Osnove fizike", Young and Freedman, *University Physics*.

mehanike. Dakle, njegov paradoks je u tome da iako je u mnogo čemu *pogrešan*, ipak ima nezobilaznu ulogu u razvoju kvantne teorije. Naime, neki njegovi elementi, odnosno pojmovi koje je uveo, **jesu** točni: pojam stacionarnih stanja (tj. dio prvog postulata), drugi postulat u cjelini, princip korespondencije[‡], opći koncept kvantizacije impulsa vrtnje (iako je relacija (5.37) netočna), te pojam kvantiziranih energija vezane čestice – sve je to prisutno i igra ključnu ulogu u kvantnoj mehanici.

5.5 Zadaci 5

5.1.) Po klasičnoj elektrodinamici, akcelerirani naboji moraju zračiti.

$$\text{Slavna Larmorova formula} \qquad P = \mathrm{k_c}\,\frac{2}{3}\,\frac{e^2\,a^2}{c^3} \tag{5.55}$$

je klasični nerelativistički rezultat (ali koji ima i relativističko poopćenje) za snagu P koju zrači naboj e koji trpi ubrzanje a. Ako pretpostavimo da u času $t = 0$ vodikov atom ima radijus od 1Å, te da se elektron u njemu giba po kružnoj stazi,

a) Kolika je akceleracija a u času $t = 0$?

b) Kolika je početna frekvencija kojom atom zrači?

c) Koliko vremena treba da se radijus smanji od 1Å do 0.1Å? (Radi jednostavnosti pretpostavimo da je ubrzanje a konstantno.)

d) Kolika je frekvencija elektromagnetskog zračenja atoma na radijusu od 1 Å, 0.5 Å i 0.1 Å pod tim pretpostavkama?

5.2.) Nađite najmanju udaljenost na koju se projektil naboja $z\,e$ i mase

[‡]Princip korespondencije je naravno općenitiji od Bohrovog modela. Želimo međutim naglasiti da u limesu velikih kvantnih brojeva, Bohrov model daje korektan klasični limes u skladu s principom korespondencije.

M može približiti centru fiksiranog Coulombovog potencijala naboja $Z\,e$ ako je projektil: a) proton, b) deuteron, c) triton, d) α-čestica.

Kako se međusobno odnose udaljenosti u slučajevima a)–d) ako su ulazna brzina projektila i atomski broj Z uvijek isti?

Provedite numerički račun za konkretne vrijednosti $Z = 79$ (atomski broj zlata) i ulazne, asimptotske brzine $v_\infty = 2 \cdot 10^7$ m/s.

5.3.) *a)* Pokažite da su za jednoelektronske sustave proizvoljnog atomskog broja Z (dakle ione He^+, Li^{++}, itd.) kvantizirani radijusi stacionarnih orbita Bohrovog modela dani izrazom

$$r_n = n^2 \, \frac{\hbar^2}{\mathrm{k_c} Z e^2 m_e} = \frac{a_0}{Z} \, n^2 = n^2 \, r_1 \,, \qquad (n = 1, 2, 3, ...) \,. \tag{5.56}$$

b) Nađite formulu koja povezuje Bohrov radijus a_0 s Comptonovom valnom duljinom elektrona λ_C.

5.4.) Pokažite da su za jednoelektronske sustave proizvoljnog atomskog broja Z, diskretne vrijednosti energija elektrona u stacionarnim stanjima

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{\mathrm{k_c}^2 \, Z^2 \, e^4 \, m_e}{2 \, \hbar^2} = -\frac{Z^2 \, \mathbb{R}}{n^2} \,, \qquad (n = 1, 2, 3, ...) \,. \tag{5.57}$$

5.5.) Ako je energija pobuđenog atoma vodika jednaka -3.4 eV, koliki je iznos impulsa vrtnje L po Bohrovom modelu (tj. po "staroj kvantnoj teoriji")?

Usporedite taj L s mogućim iznosima pravog impulsa vrtnje, za koje točna kvantna teorija nalazi da moraju biti oblika $L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$, gdje je l bilo koji cijeli broj između $l_{\min} = 0$ i $l_{\max}$. Iskoristite da ćemo za atom vodika kasnije naći da je njegovom elektronu $l_{\max}$ ograničen, i to izrazom $l_{\max} = n-1$, gdje je n glavni kvantni broj.

5.6.) Neka je atom vodika u stanju s velikim glavnim kvantnim brojem (tzv. Rydbergov atom), recimo $n = 100$. Koliki je onda iznos impulsa vrtnje L po Bohrovom modelu, a kolika su, redom, tri najmanja, te tri najveća moguća iznosa veličine orbitalnog impulsa vrtnje po točnoj kvantnoj teoriji?

Usporedite dobivene rezultate, te komentirajte slaganje s Bohrovim principom korespondencije između stare i prave kvantne teorije, te klasične fizike. Približavamo li se limesu klasične fizike ako n raste ali l ostaje mali?

5.7.) Izvrijedni izraz za brzinu (5.46) elektrona u stanju Coulombovog oscilatora za nekoliko karakterističnih udaljenosti od jezgre (odnosno protona, ako $Z = 1$): $z = 0.75\, z^{\text{okr}}$, a_0, $0.1a_0$, $a_0/100$, $a_0/1000$, 10^{-14}m, 10^{-15}m.

Poglavlje 6

De Broglieovi valovi i Schrödingerova jednadžba

Do početka dvadesetih godina postalo je jasno da je napredak teorijskog razumijevanja kvantnih fenomena u ozbiljnom zastoju. Ne samo da nakon Sommerfeldovog poopćenja Bohrovog modela i uključenja relativističkih efekata u takav opis atoma vodika nije bilo novih uspjeha, nego se nikako nije uspijevalo doći do objašnjenja za Bohrove kvantne postulate.

6.1 Kraj početka: de Broglieva hipoteza o valovima materije

Znanstveni je proboj konačno došao 1923. na neočekivan način i iz neočekivanog smjera. Francuski princ Louis de Broglie, tada doktorski student fizike, predložio je da kvantna dualnost bude simetrična: kako su Einsteinovi kvanti elektromagnetskih valova (fotoni) pokazivali čestična svojstva, tako i čestice mora da imaju valna svojstva, smatrao je de Broglie. Konkretno, kako su kod fotona njegovi čestični parametri, energija i impuls, Planckovom konstantom povezani s frekvencijom i valnom duljinom odgovarajućeg vala,

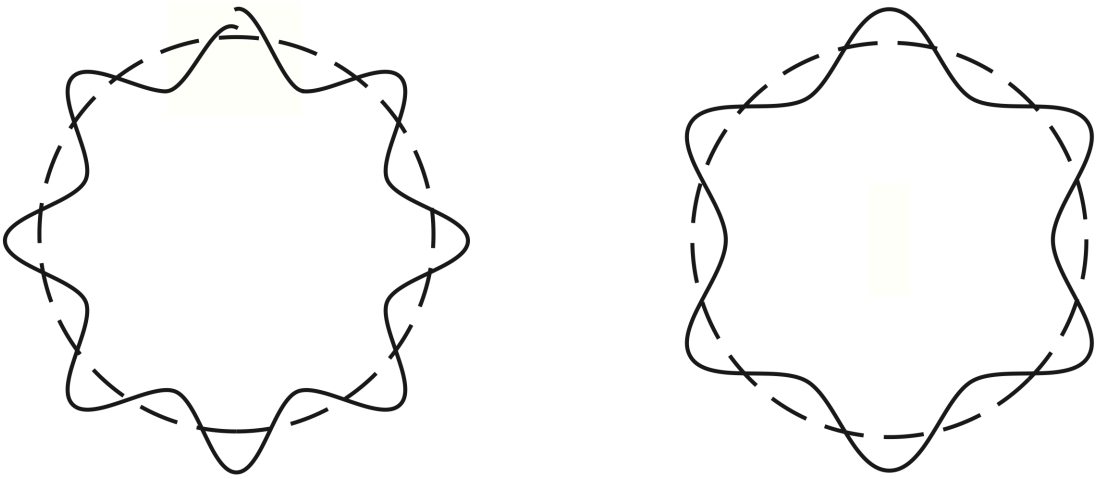
$$E = h\nu \equiv \hbar\omega\,, \qquad \text{te} \qquad p = \frac{h}{\lambda} = \hbar\frac{2\pi}{\lambda} \equiv \frac{\hbar}{\lambda\!\!\!^{-}} = \hbar k\,, \qquad (6.1)$$

trebalo bi da te relacije vrijede i za masivne mikro-objekte poput elektrona i protona, predložio je de Broglie. Drugim su se fizičarima oni dotad činili kao obične klasične čestice, dakle kao nekakva električno nabijena zrnca sačme, samo jako malena. Njihova masa $m > 0$ zaista čini drastičnu razliku, jer zbog nje mogu mirovati; to jest, postoji referentni sustav u kojem im je brzina nula, a nikako ne mogu egzaktno dosegnuti brzinu svjetosti c. Nasuprot tome masa fotona je nula, pa se (u vakuumu) uvijek, u *svakom* referentnom sustavu, kreću brzinom svjetlosti $c = \nu\lambda$. Odatle $h\nu = E_\gamma = c\,p_\gamma = c\,h/\lambda = c\,\hbar\,k$, pa u (6.1) izrazi za energiju i impuls konzistentno slijede jedni iz drugih u slučaju fotona. Većina je međutim teško uviđala da relacije (6.1) ipak mogu i za masivne čestice konzistentno funkcionirati i u relativističkoj i u nerelativističkoj granici. (Vidi na pr. riješeni Zadatak 6.3.) Zato je de Broglieva hipoteza dočekivana ne samo sa sumnjom, nego često i s podsmijehom, sve dok ju Davisson i Germer, te nezavisno G.P. Thomson, nisu eksperimentalno potvrili 1927. No brzo se pročula, te stekla i mnogo pristašâ, jer je konačno dala objašnjenje za misteriju Bohrovog postulata formuliranog preko kvantizacije impulsa vrtnje (5.37):

$$n\,\frac{h}{2\pi} \;=\; n\,\hbar \;=\; L \;=\; r\,p = r\,\frac{h}{\lambda} \qquad \Longleftrightarrow \qquad n\,\lambda \;=\; 2\pi\,r\;. \tag{6.2}$$

Iako zapravo veoma pogrešna, relacija $L = n\hbar$ (5.37) se tada još smatrala neizbježnom za objašnjenje spektra diskretnih energijâ atoma vodika u dozvoljenim stanjima, ali do tada je bilo posve neobjašnjivo od kuda potječe. De Broglievom se hipotezom međutim svela na $2\pi\,r = n\,\lambda\,,\ n \in \mathbb{N}$, tj. na uvjet postojanja stojnih valova na kružnici radijusa r, gdje cijeli broj valnih duljina mora biti jednak opsegu kružnice, kao što se vidi na Slici 6.1.

Već nakon nekoliko godina, daljim razvojem teorije na osnovi de Broglieve hipoteze, a osobito rješavanjem Schrödingerove jednadžbe za vodikov atom, postalo je jasno da je stacionarnost kvantnih stanjâ zaista povezana sa stojnim kvantnomehaničkim valovima, ali i da su Slika 6.1 i formula (6.2) tek naivna ilustracija toga. Također se pokazalo da Bohrova relacija (5.37) daje pogrešne veličine impulsa vrtnje L. Međutim, možemo odmah lako pokazati i jednu primjenu de Broglieve valne duljine $\lambda = h/p$ od vrlo velike trajne vrijednosti. To je **rješenje zagonetke stabilnosti atoma**. Usput ćemo doći do boljeg razumijevanja zašto je Bohrov radijus (5.28) dobra procjena veličine atoma.



Slika 6.1: Lijevo je ilustracija stanja gdje po kružnici ide val valne duljine koja nema poseban odnos prema opsegu orbite. Tako ne zadovoljava ni uvjet stacionarnosti, nego će se brzo poništiti destruktivnom interferencijom. Desno je pak ilustracija stanja kada na kružnici može postojati stojni val, jer opseg kružnice odgovara cijelom broju valnih duljina. Upravo je to uvjet stacionarnosti, dat relacijom $n\lambda = 2\pi r$. Ovdje je konkretno opseg jednak šest valnih duljina. Ako su to de Broglieve valne duljine, onda desna slika ilustrira stojni de Brogliev val koji bi odgovarao stacionarnom stanju vodikovog atoma u Bohrovom modelu s kvantnim brojem $n = 6$; dakle, stojni val na kružnici Bohrova radijusa $r_6 = 36\, a_0$.

6.1.1 De Broglieva valna duljina i stabilnost kvantnih sustava

Nerelativističku energiju čestice ($E_{\rm Nrel}$) možemo pisati kao zbroj njene nerelativističke kinetičke energije $T = p^2/2m$ i njene potencijalne energije V. U slučaju elektrona zarobljenog u vodikovom atomu, $V = V(r)$ je Coulombov privlačni potencijal između elektrona i jezgre u ishodištu ($r = 0$), pa

$$E_{\rm Nrel} \,=\, T + V \,=\, \frac{p^2}{2m} - {\rm k_c}\,\frac{e^2}{r} \,=\, \frac{h^2}{2m\,\lambda^2} - {\rm k_c}\,\frac{e^2}{r} \,=\, \frac{h^2}{2m\,b^2\,r^2} - {\rm k_c}\,\frac{e^2}{r}\ . \quad (6.3)$$

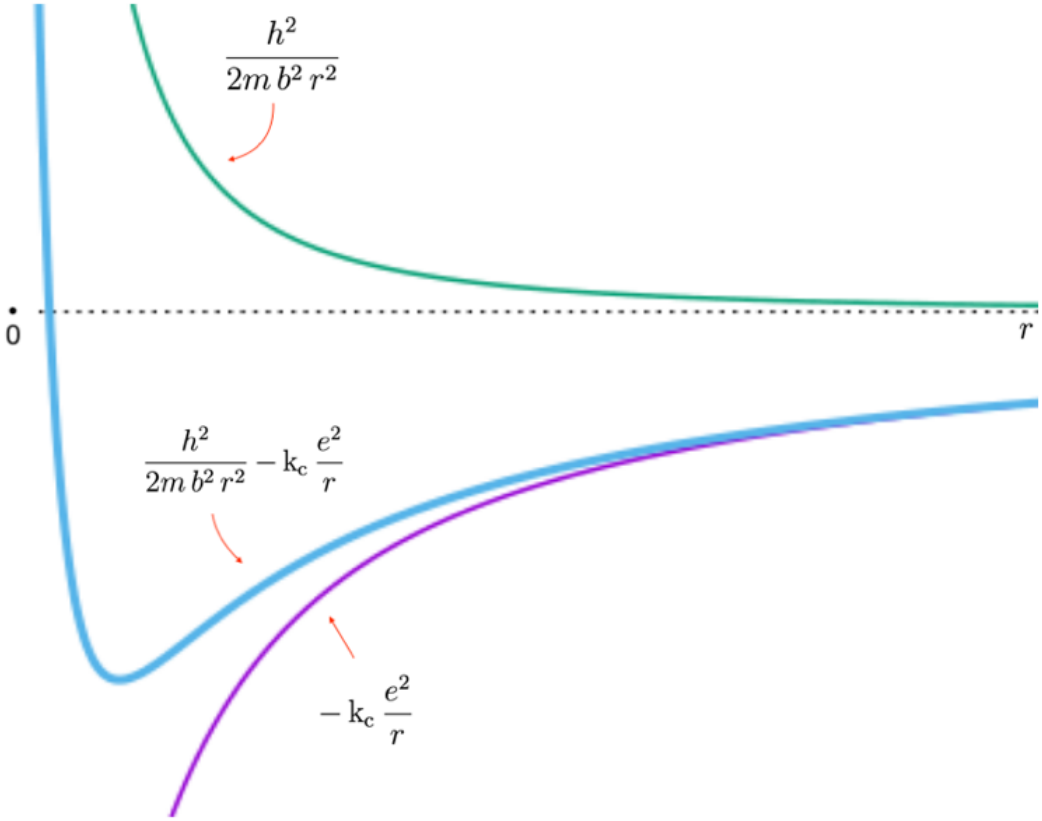
Druga jednakost u (6.3) je relacija radi koje smo se pitali zašto elektron ne padne na jezgru gubeći energiju elektromagnetskim zračenjem, kad ta relacija naizgled nema konačnog potencijalnog minimuma. Ali sada je uvedena prostorna skala, de Broglieva valna duljina λ, koja karakterizira sâm elektron, pa je za očekivati da postoji mehanizam koji se protivi lokalizaciji elektrona na radijuse r koji su drastično manji od njegove vlastite valne duljine. Budući da je iznos impulsa obrnuto proporcionalan toj valnoj duljini, $p = h/\lambda$, taj mehanizam je očito kinetička energija T, koja je to veća što je λ manji, pa će dati efektivni odbojni potencijal. Iz dimenzionalnih razloga možemo pisati $\lambda = b\,r$, gdje je b nekakva pozitivna bezdimenzionalna veličina, pa slijedi zadnja jednakost u (6.3). Budući da pozitivan doprinos kinetičke energije $T \propto 1/r^2$ nadjačava privlačnu, negativnu potencijalnu energiju $V \propto 1/r$ za dovoljno mali r, dok je za dovoljno velike r obratno, de Broglieva hipoteza dovodi do ukupne energije s minimumom na $r > 0$. (Sve to ilustrira Slika 6.2.) Stoga nema pada elektrona na jezgru, nego je atom stabilan, s ravnotežnom udaljenosti elektron-jezgra iznosa $r = r_{\tt MIN}$ (6.4) na kojoj energija (6.3) ima minimum.

Uvjet minimuma energije je da derivacija energije (6.3) po r iščezava:

$$\frac{\partial E_{\rm Nrel}}{\partial r} \,=\, 0 \qquad \text{što daje} \qquad r_{\tt MIN} \,=\, \frac{h^2}{{\rm k_c}\,e^2\,m}\,\frac{1}{b^2} \,=\, a_0\left(\frac{2\pi}{b}\right)^2\ , \qquad (6.4)$$

gdje smo prepoznali osnovni Bohrov radijus $r_1 = a_0$ (5.28).

Dakle, **pokazali smo stabilnost atoma u općem smislu**, razmatranjem balansa energije *kvantnih* čestica (kvantona) koje imaju valnu duljinu



Slika 6.2: Prikaz kinetičke, potencijalne i ukupne energije (6.3) masivnog električno nabijenog kvantona vezanog privlačnim Coulombovim potencijalom. Zbog $\lambda = b\,r$, veza impulsa i de Broglieve valne duljine $p = h/\lambda$ pretvara kinetičku energiju masivnog kvantona u efektivni odbojni potencijal koji stabilizira to vezano stanje (atom), jer s Coulombovim potencijalom daje ukupnu energiju s minimumom na konačno velikom radijusu (6.4), $r = r_{\mathtt{MIN}} = h^2/(\mathrm{k_c}\,e^2\,m\,b^2)$.

$\lambda = h/p$. Međutim, za konkretniju sliku strukture atoma naravno trebamo konkretniju specifikaciju bezdimenzionalne veličine b.

Ako na primjer **pretpostavimo** da su stacionarna stanja vodikovog atoma moguća samo kada na kružnim orbitama njegovog elektrona postoji stojni val, time zahtijevamo da de Broglieva valna duljina vezanog elektrona mora zadovoljavati uvjet postojanja stojnih valova na kružnici (6.2). U tom slučaju bezdimenzionalni faktor b iznosi točno $b = 2\pi/n$. Radijusi (6.4) koji minimiziraju energiju su tada odgovarajući Bohrovi radijusi r_n, a odgovarajuće stacionarne energije za sukcesive slučajeve $n = 1, 2, 3...$ upravo energije E_n potrebne za reproduciranje generalizirane Balmerove formule (5.19):

$$r_{\texttt{MIN}} \,=\, r_n \,=\, a_0\, n^2 \;, \qquad E_n \,=\, -\,\frac{\mathrm{k_c}\, e^2}{2\, a_0\, n^2} \,=\, \frac{E_1}{n^2} \,=\, -\,\frac{\alpha}{2n^2}\, mc^2 \,. \tag{6.5}$$

Apsolutno stabilno stacionarno stanje je naravno osnovno stanje s $n = 1$ i najnižom mogućom energijom $E_1 = -\,\alpha\, mc^2/2 \,=\, -\,\mathbb{R} \,=\, -\,13.6$ eV.

Naravno, ovo ne znači potvrdu temeljne ispravnosti Bohrovih kvantnih uvjeta, jer ostaju problemi poput neispravno date kvantizacije impulsa vrtnje (5.37) i s tim povezana nekonzistentnost opisa kvantnih sustava preko oštro definiranih radijusa u stacionarnim stanjima. To se prevladalo, i ispravne kvantnomehaničke rezultate (poput prosječnih vrijednosti (5.53) i (5.54)) dobilo računima pomoću **valnih funkcija**, do kojih se pak došlo teorijskom nadogradnjom prvobitne de Broglieve hipoteze.

6.2 Valne funkcije de Broglievih valova zadovoljavaju Schrödingerovu jednadžbu

Naime, ako se *kvantnim* česticama (kvantonima) pridružuju frekvencije i valne duljine, to znači da osciliraju u vremenu (t) i prostoru ($\boldsymbol{r}$). Te vremenske i prostorne oscilacije kvantnih česticâ, koje je de Broglie smatrao "valovima materije", treba da su, kao i ostali valovi, matematički opisane valnim funkcijama $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ koje su rješenja odgovarajućih **kvantnih valnih jednadžbi**. Međutim, te jednadžbe su se za masivne kvantne čestice počele

otkrivati, **počevši sa Schrödingerovom jednadžbom**, tek koju godinu *nakon* de Broglieve hipoteze 1923. On je i bez njih, pa dakle i bez njihovog rješavanja, na osnovi teorije relativnosti spekulirao da "valovi materije" slobodnih masivnih kvantnih čestica imaju prostorno-vremensku ovisnost analognu onoj slobodnih (tj. bezizvornih) elektromagnetskih valova, poput putujućih ravnih valova (2.11). To jest, pretpostavio je da za slobodne čestice te valne funkcije mogu biti sinusne (i kosinusne) funkcije relativistički invarijantnih fazâ $\phi(x,t) = kx \mp \omega t$ (vidi Sekciju 6.3).

Znači, de Broglieu su inspirativan primjer bili *elektromagnetski valovi u vakuumu*. Oni se za svaku frekvenciju odnosno valnu duljinu, šire istom (i to maksimalnom mogućom) brzinom $c = \lambda/\tau = \nu\lambda = \omega/k$. Zato na primjer članove u (2.11), tj. kosinusne valove, možemo ovako napisati kao manifestno putujuće brzinom c prema $+\infty$ ili $-\infty$:

$$\cos\phi(x,t) \;=\; \cos[2\pi(\frac{x}{\lambda} \mp \frac{t}{\tau})] \;=\; \cos\left[\frac{2\pi}{\lambda}\,(x \mp c\,t)\right] \;=\; \cos\left[k\,(x \mp c\,t)\right]\,. \tag{6.6}$$

(Tu smo, radi koncentracije na aspekte bitne ovdje, ispustili vektore polarizacije $\mathbf{e}_{\pm}$, budući da ih ionako nema u tom obliku kod de Broglievih valova masivnih kvantnih čestica).

No i onda kada iznos brzine $\omega/k \equiv v(\omega)$ nije konstanta nego ovisi o frekvenciji, to je svejedno brzina monokromatskog vala, a $\phi(x,t)$ svejedno predstavlja fazu putujućeg vala. De Broglie je ne samo za fotone, nego za sve mikročestice pretpostavio Planck-Einstein-de Broglieove kvantne veze (6.1) između vrijednosti čestičnih parametara E i p, te vrijednosti valnih parametara ω i λ, koji su naravno tada još bili sasvim hipotetski. Na primjer, faza hipotetskog monokromatskog vala masivne čestice, koji rastom vremena t putuje prema većim x, bila bi

$$\phi_k(x,t) \;=\; 2\pi\left(\nu\,t - \frac{x}{\lambda}\right) \;=\; -k(x - v(\omega)\,t\,) \;=\; \omega\,t - k\,x \;=\; \frac{1}{\hbar}\,(E\,t - p\,x)\,, \tag{6.7}$$

kao i kod fotona, dakle relativistički invarijantna (vidi Sekciju 6.3).

Kada su o hipotetskim de Broglievim valovima raspravljali fizičari u Zürichu, Schrödingeru je Debye, tada već vrlo istaknuti seniorniji kolega, naglasio da je neozbiljno raspravljati o nekakvim valovima ako ne znamo njihovu valnu jednadžbu. Zato ju je Schrödinger odlučio naći. To mu je i uspjelo.

Schrödingerova originalna diskusija izlazi iz okvira ovog kolegija. Ionako treba uočiti da je i on svoju jednadžbu više "napipao" nego "izveo" u strogom smislu, jer to i nije moguće s klasične razine, budući da je ta nova, kvantna jednadžba gibanja fundamentalnija od onih na klasičnoj razini. Mi ćemo se zadovoljiti time da, počevši od najjednostavnijeg primjera valne funkcije oblika ravnog vala, postepeno "pogađamo i provjeravamo" njene sve složenije verzije. Od najjednostavnijeg slučaja slobodne čestice prijeći ćemo na nešto složenije slučajeve usput se pomažući plauzibilnim heurističkim pretpostavkama.

Sad ćemo si jako pomoći tako što ćemo unaprijed preuzeti saznanje da su kvantne valne funkcije kompleksne. Zato se trenutno nećemo baviti putujućim valovima oblika sinusnih ili kosinusnih funkcijâ (6.6), nego s njima povezanim kompleksnim eksponencijalama, ili kraće – faznim faktorima ("fazorima") $e^{\mathrm{i}\phi} = \cos\phi + \mathrm{i}\,\sin\phi$, poput putujućeg vala *u jednoj dimenziji*,

$$\psi_k(x,t) \,\propto\, e^{-\mathrm{i}\,\phi_k(x,t)} \,=\, e^{\mathrm{i}\,(k\,x\,-\,\omega\,t\,)} \,=\, e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,(p\,x\,-\,E\,t\,)}\,. \tag{6.8}$$

Ravni val (6.8) je monokromatski, jer sadrži samo jednu frekvenciju $\omega = 2\pi\nu$ i samo jedan valni broj $k = 2\pi/\lambda$. Zbog Planckove relacije $E = \hbar\omega$ odnosno de Broglieve relacije $p = h/\lambda = \hbar k = h/\lambda$ koje vrijede za slučaj kvantnih objekata, ravnom valu (6.8) odgovara samo jedna, točno određena energija E i samo jedan, točno određen iznos p linearnog impulsa.

Takvi jednostavni slučajevi će nam pomoći da postepeno "pogodimo" kako izgleda Schrödingerova jednadžba, i to najprije za *slobodnu* česticu. Naime, ako potencijalna energija čestice ovisi o položaju, $V = V(x)$, na nju djeluje neiščezavajuća sila $F(x) = -\partial V(x)/\partial x \neq 0$, a ona mijenja impuls čestice:

$$-\,\frac{\partial V}{\partial x} \,=\, F(x) \,=\, m\,a(x) \,=\, m\,\frac{d^2x(t)}{dt^2} \,=\, \frac{dp}{dt}\,. \tag{6.9}$$

Tada ne bismo imali konstantan impuls kakav je u ravnom valu (6.8), nego bi ovisio o vremenu i položaju. Ni de Broglievu valnu duljinu $\lambda = h/p$ ne bismo mogli precizno definirati, a eventualna valna funkcija bi morala biti složenija od ravnog vala (6.8).

Zato ćemo se za početak problem pojednostaviti tako što ćemo se ograničiti na slučajeve kada $V = konstanta$, pa i linearni impuls p mora biti konstantan. Maksimalno ćemo pojednostaviti ako se ograničimo na slučaj

slobodnih čestica, potpuno bez interakcije; to jest $V = 0$ svagdje. Prirodno je tako početi i zato što smo ravne valove uzeli po analogiji s elektromagnetskim ravnim valovima (2.11) koji su rješenja slobodne valne jednadžbe, one bez izvorâ (tj. bez nabojâ i strujâ). Kada su ti izvori prisutni, rješenja Maxwellowih jednadžbi za promjenljiva polja odnosno putujuće valove, znatno su kompliciranija. Ravni elektromagnetski valovi su ono što u valnoj optici odgovara širenju ravne zrake svjetla u optici zrakâ. Analognu situaciju možemo očekivati i za de Broglieve kvantne valove, tzv. "valove materije": ravni valovi masivnih kvantona, kvantnih čestica, trebalo bi da odgovaraju pravocrtnom gibanju slobodne klasične čestice konačne mase, $m > 0$.

Slučaj nerelativističke slobodne ($V = 0$) kvantne čestice znači

$$\hbar\omega \;=\; E \to E_{\mathrm{Nrel}} \;=\; T = \frac{p^2}{2m} \;=\; \frac{\hbar^2\, k^2}{2m} \tag{6.10}$$

i u ravnom "valu materije" (6.8). No tada i valna jednadžba koju on zadovoljava mora reproducirati relaciju (6.10) između impulsa p i nerelativističke kinetičke energije, tj. energije slobodne masivne nerelativističke čestice, $E \;=\; T \;=\; p^2/2m \;\equiv H_0$. Ovaj zadnji simbol smo uveli zato što se funkcija energije izražena preko impulsa (umjesto brzine) naziva Hamiltonova funkcija ili *Hamiltonijan*, oznaka H. Supskript $_0$ na H označava da se radi o *slobodnom* Hamiltonijanu, gdje $V = 0$.

Da bi se to postiglo, očito je da na (6.8) mora djelovati *jedna* parcijalna derivacija po vremenu i *dvije* parcijalne derivacije po prostornoj koordinati, uz odgovarajuću kombinaciju konstantnih faktora: mase čestice, Planckove konstante i imaginarne jedinice i. Tako vidimo da ravni val $\psi_k(x,t)$ (6.8) zadovoljava diferencijalnu jednadžbu gibanja, tzv. *slobodnu vremenski ovisnu Schrödingerovu jednadžbu* u jednoj dimenziji,

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\Psi(x,t) = -\,\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\Psi(x,t) \tag{6.11}$$

za slučaj čestice mase m, impulsa p i njima odgovarajuće energije $E = p^2/2m$, jer kada $\Psi(x,t) = \psi_k(x,t)$, jednadžba (6.11) daje

$$E\,\psi_k(x,t) = \frac{p^2}{2m}\,\psi_k(x,t)\;, \quad \forall\, k,\ \text{pa kraćenje } \psi_k \text{ reproducira } E = T = H_0\,. \tag{6.12}$$

Matematika nas međutim uči da je skup rješenja jednadžbe (6.11) mnogo veći od $\{\psi_k(x,t)\}$, $\forall k$: budući da je ta jednadžba **linearna**, rješenje joj je i svaka superpozicija ravnih valova $\psi_k(x,t)$,

$$\Psi(x,t) \,=\, \sum_k b_k\, \psi_k(x,t) \quad (b_k = \text{proizvoljna konstanta } \forall k)\ , \tag{6.13}$$

iako za razliku od ravnih valova $\psi_k(x,t)$, takva superpozicija ne odgovara nekom određenom impulsu p i energiji E (6.12). Međutim, zbog (6.12) odnosno $\omega = \omega(k) = \hbar\, k^2/2m$ (6.10), jednadžbu (6.11) zasebno zadovoljava svaki pribrojnik u superpoziciji (6.13).

No budući da slobodna čestica ima kontinuirane moguće vrijednosti impulsa p, pa dakle i valnog broja k, superpozicija ravnih valova treba uključivati mogućnost ne samo diskretne sume kakva je naznačena u (6.13), nego i kontinuirane. Kontinuirana suma je integral, pa općenitu superpoziciju valova datog k (6.8) pišemo

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\, \psi_k(x,t)\, dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\, e^{ikx - i\omega(k)t}\, dk\,, \tag{6.14}$$

gdje koeficijente b_k zamjenuje kontinuirana funkcija $b(k)$. Ovime koristimo metodu tzv. Fourierove transformacije. To ćemo dodatno pojasniti u poglavljima 9 i 10, gdje detaljnije proučavamo općenita rješenja slobodne Schrödingerove jednadžbe. Ovdje je dovoljno prihvatiti da je integral suma kontinuiranih infinitezimalnih doprinosa, te da derivacije po vremenu i prostoru mogu ući pod integral. Tada, kao i za (6.13) malo prije, uvrštavanjem u (6.11) provjerimo da i kontinuirana superpozicija (6.14) **zadovoljava slobodnu Schrödingerovu jednadžbu**:

$$\begin{aligned} i\hbar\, \frac{\partial}{\partial t}\, \Psi(x,t) \;&=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\, \frac{\hbar^2\, k^2}{2m}\, e^{i(k\,x\, -\, \frac{\hbar\, k^2}{2m}\, t)}\, dk \\ &=\; -\,\frac{\hbar^2}{2m}\, \frac{\partial^2}{\partial x^2}\, \Psi(x,t)\,, \end{aligned} \tag{6.15}$$

budući da djelovanje i $i\hbar\,\partial/\partial t$ s lijeve, kao i $-(\hbar^2/2m)\,\partial^2/\partial x^2$ s desne strane jednadžbe (6.11), daju istu podintegralnu funkciju za svaki k, zbog (6.10).

6.2.1 Schrödingerove jednadžbe s raznim potencijalnim energijama V

Primijetimo da ako neiščezavajuća potencijalna energija čestice **ne** ovisi o položaju, dakle ako $V = konstanta \neq 0$, sila još uvijek iščezava jer $\partial V/\partial x = 0$, pa impuls p ostaje konstantan, kao i valni broj k. Naravno, za datu energiju E je p manji, jer onda E nije cijela kinetička kao u (6.10), nego je dio u V:

$$\hbar\omega = E = T + V \;=\; \frac{p^2}{2m} + V \;=\; \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V \;=\; H_0 + V \;\equiv H\,. \qquad (6.16)$$

To sugerira da se Schrödingerova jednadžba treba iz (6.11) promijeniti u

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\Psi(x,t) \;=\; \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right]\Psi(x,t)\,. \qquad (6.17)$$

Lako se vidi da tu jednadžbu zadovoljavaju opet ravni valovi (6.8), to jest $\Psi(x,t) = \psi_k(x,t)$; naravno, sa smanjenim ali i dalje konstantnim vrijednostima p odnosno k, reproducirajući relaciju za energiju (6.16) s **konstantnom** potencijalnom energijom V. Opet, tu jednadžbu zadovoljavaju i njihove općenite superpozicije (6.13) odnosno (6.14). Naravno, pritom superpozicijama ("mješavinama") s raznim *iznosima* impulsa ni sada ne pripadaju određene vrijednosti energije (6.16).

Jednadžba (6.17) prirodno sugerira da vremenski ovisna Schrödingerova jednadžba zadržava isti oblik, **linearan** u valnoj funkciji $\Psi(x,t)$, i onda kada potencijalna energija nije konstantna, $V = V(x)$, pa se impuls $p = \hbar k$ mijenja. Štoviše, moguća je i ovisnost o vremenu, $V = V(x,t)$, kada sustav energiju gubi (emitira) ili ju prima (apsorbira). I zaista, kada se jednadžba (6.17) tako poopći, dolazi se do ispravnih rezultata.

Međutim, takvim problemima, kada $V \neq konstanta$, pozabavit ćemo se tek nekoliko poglavljâ kasnije, jer tada rješenja $\Psi(x,t)$ moraju biti složenija i na žalost teže dokučiva od ravnih valova $\psi_k(x,t)$ (6.8) i njihovih superpozicija (6.13). Koliko je Schrödingerova jednadžba (6.18) tada lakše ili teže rješiva, ovisi za svaki konkretan problem o potencijalnoj energiji $V(x,t)$. Njoj zbog potpune općenitosti ovdje dozvoljavamo još i ovisnost o vremenu t, pa vremenski ovisna Schrödingerova jednadžba glasi

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\Psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right]\Psi(x,t) \qquad (6.18)$$

u najopćenitijem slučaju u jednoj prostornoj dimenziji.

6.2.2 Poopćenje na tri prostorne dimenzije

Dosad smo se zbog jednostavnosti ograničili na funkcije samo jedne prostorne varijable, $\boldsymbol{r} \to x$. I inače ćemo tako često raditi, posebno onda kada se time ništa bitno ne gubi.

Međutim, sâm zapis jednadžbi lako se poopći i na više dimenzijâ. Umjesto samo jedne koordinate x, u tri dimenzije imamo vektor položaja $\boldsymbol{r} = (x, y, z)^{\mathtt{T}}$, kao i druge vektore, poput vektora impulsa $\boldsymbol{p} = (p_x, p_y, p_z)^{\mathtt{T}}$ i valnog vektora $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{p}/\hbar$. U Kartezijevom koordinatnom sustavu, raspisujemo ih po komponentama pomoću jediničnih osnih vektora baze $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$:

$$\boldsymbol{r} = \mathbf{e}_x\, x + \mathbf{e}_y\, y + \mathbf{e}_z\, z\,, \qquad \boldsymbol{p} = \hbar\, \boldsymbol{k} = \hbar\, (\mathbf{e}_x\, k_x + \mathbf{e}_y\, k_y + \mathbf{e}_z\, k_z)\,, \tag{6.19}$$

dok je valni broj $k \equiv |\boldsymbol{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_y^2} = p/\hbar$, a kinetička energija je

$$T = H_0 \equiv H_{\text{kin}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\,m} = \frac{\hbar^2\, \boldsymbol{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2\, k^2}{2m}\,. \tag{6.20}$$

Ravni val u tri dimenzije pišemo slično kao (6.8), naime

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}, t) \,\propto\, e^{-\mathrm{i}\,\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r},t)} = e^{\mathrm{i}\,(\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega\, t\,)} = e^{\,\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,(\,\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} \,-\, E\, t\,)}\,, \tag{6.21}$$

tako da je ovdje $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} \leftrightarrow k\, x$ (a za kvantne čestice to ujedno znači $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} \leftrightarrow p\, x$) jednostavan recept prelaska između dimenzija $3 \leftrightarrow 1$.

Na taj način možemo vidjeti da je jednodimenzionalnu slobodnu Schrödingerovu jednadžbu (6.11) lako poopćiti na trodimenzionalnu slobodnu Schrödingerovu jednadžbu (6.22). Naime, zbog $p\, x \to \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} = p_x x + p_y y + p_z z$ u fazi-argumentu ravnih valova, u Schrödingerovoj jednadžbi (6.11) očito samo trebamo proširiti dvostruke parcijalne derivacije po x istim takvim dvostrukim parcijalnim derivacijama po y i z, pa dobivamo

$$\mathrm{i}\hbar\, \frac{\partial}{\partial t}\, \psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}, t) = -\,\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}, t) \;\equiv\; -\,\frac{\hbar^2}{2m}\, \nabla^2\, \psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}, t)\,. \tag{6.22}$$

Tu jednadžbu trodimenzionalni ravni valovi (6.21) očito zadovoljavaju, jer reproduciraju $E = \boldsymbol{p}^2/2m \equiv H_0$ sve dok je energija u njima $\hbar\omega = E = T$ (6.20), to jest, sve dok E označava energiju slobodne nerelativističke čestice.

Kao i u jednodimenzionalnom slučaju, ako slobodnu trodimenzionalnu Schrödingerovu jednadžbu (6.22) modificiramo neiščezavajućom, ali **konstantnom** potencijalnom energijom V, opet će ravni valovi, ali trodimenzionalni $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}, t)$ (6.21), biti rješenja koja će konzistentno reproducirati nerelativističku energijsku relaciju

$$\hbar\omega = E = T + V = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m} + V = H_0 + V \equiv H\,. \qquad (6.23)$$

Zbog linearnosti slobodne Schrödingerove jednadžbe (6.22) i njenog proširenja s $V = konstanta \neq 0$, rješenja tih jednadžbi su očito i superpozicije ravnih valova, dakle oblici (6.13). (Jasno, uz supstituciju $\psi_k(x,t) \to \psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}, t)$.)

Ako se ne ograničimo na slučajeve sa slobodnim rješenjima (6.21), tj. ako **nemamo** slučaj bez sile na kvanton, nego $V \neq konstanta$, onda, kao i u jednoj dimenziji, uspješna primjena u praksi pokazuje da se *općenita vremenski ovisna Schrödingerova jednadžba* (6.24) dobiva dodavanjem **ne**konstantne potencijalne energije $V(\boldsymbol{r}, t)$ u slobodnu jednadžbu (6.22):

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}, t)\right]\Psi(\boldsymbol{r}, t)\,. \qquad (6.24)$$

To je kvantna jednadžba gibanja i u mikrosvijetu ima ulogu koju u makrosvijetu imaju nerelativističke jednadžbe gibanja klasične mehanike, $\boldsymbol{F} = m\,d^2\boldsymbol{r}(t)/dt^2$.

Kod većine relevantnih problema, potencijalna energija nije ovisna o vremenu t. Tada možemo pojednostaviti ovako: $V(\boldsymbol{r}, t) \to V(\boldsymbol{r})$.

Koliko je Schrödingerovu jednadžbu (6.24) teško riješiti, ovisi o tome kakav je potencijal $V(\boldsymbol{r})$. To naravno varira od problema do problema. Evo, mi smo ju već riješili ravnim valovima i njihovim superpozicijama (6.13) i u jednoj i u tri dimenzije u slobodnom slučaju, za $V = 0$, pa i malo općenitije, za $V = konstanta$. Schrödinger ju je riješio i za Coulombov potencijal $V(\boldsymbol{r}) = V(r) = -\mathrm{k_c}\,e^2/r$, te tako dobio prvi pravi kvantnomehanički opis vodikovog

atoma (u nerelativističkoj aproksimaciji i uz aproksimativnu pretpostavku da je elektrostatski Coulombov potencijal tu jedina interakcija).

Naravno, rješenja $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ uz takve $V(\boldsymbol{r})$ neusporedivo su složenija od ravnih valova $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r},t)$ i njihovih superpozicija (6.13), te ćemo se morati još puno potruditi da dođemo do razine da ih dobijemo, a preko njih i rezultate poput (5.54), kojeg smo u prethodnom poglavlju prilikom diskusije samo naveli kao ilustrativan primjer rezultatâ kakvi će nam biti nužni za razumijevanje atoma vodika. No kao i ravni val (6.21), sva rješenja $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ moraju biti kompleksna, zbog prisustva imaginarne jedinice, i, uz derivaciju po vremenu u Schrödingerovoj jednadžbi.

6.3 O de Broglievoj relativističkoj motivaciji

Obično se iznošenje de Broglieve hipoteze prikazuje kao čista spekulacija motivirana samo prijedlogom simetričnosti između fotona i masivnih čestica, izrečenim zapravo na filozofskoj razini, a ovdje kratko iznesenim na početku Sekcije 6.1. Zaista se na prvi pogled može činiti tako, jer su kod fotona relacije (6.1) između energije i frekvencije očigledno konzistentne s relacijama između impulsa i valne duljine (odnosno valnog broja $k \equiv 2\pi/\lambda$) jer im je masa jednaka nuli, $m_\gamma = 0$. Zato se u svakom referentnom inercijalnom sustavu (u vakuumu) kreću brzinom svjetlosti $c = \nu\,\lambda$, pa $h\nu = E_\gamma = c\,p_\gamma = c\,h/\lambda = c\,\hbar\,k$. Dakle, foton je poseban jer ima masu nula i energiju mirovanja nula, a njegova energija E_γ je bezmasena granica ($m \to 0$) općenitog relativističkog izraza za energiju

$$E \;\equiv\; E_{\mathrm{rel}} \;=\; c\,\sqrt{(\,m\,c\,)^2 \,+\, \boldsymbol{p}^{\,2}}\;, \tag{6.25}$$

kao što smo već istakli kod razmatranja Comptonovog efekta.

S druge pak strane, standardni nerelativistički izraz za kinetičku energiju, tj. energiju nerelativističke slobodne čestice, $T = \boldsymbol{p}^{\,2}/2\,m = m\,\boldsymbol{v}^{\,2}/2$ možemo dobiti samo uz uvjet $m > 0$, tj. samo za masivnu česticu. Naime, relativističku energiju (6.25) razvijamo u potencije $p^2/(mc)^2$ odnosno v^2/c^2 :

$$E \;\equiv\; E_{\mathrm{rel}} \;=\; mc^2\,\sqrt{1+\frac{\boldsymbol{p}^{\,2}}{m^2c^2}} \;=\; mc^2\,\left(1+\frac{1}{2}\,\frac{\boldsymbol{p}^{\,2}}{m^2c^2}+\frac{1}{8}\,\frac{\boldsymbol{p}^{\,4}}{m^4c^4}+\,...\right)\,,$$

pa oduzimanjem energije mirovanja $mc^2 \equiv E_0$ slijedi

$$E_{\rm kin} \equiv E_{\rm rel} - mc^2 = \frac{p^2}{2\,m} + ... = \frac{m\,v^2}{2\,(1-\frac{v^2}{c^2})} + ... = \frac{m\,v^2}{2} + \mathcal{O}(\frac{v^2}{c^2})\,, \quad (6.26)$$

gdje $mv^2/2 \equiv T$, dok $\mathcal{O}(\frac{v^2}{c^2})$ predstavlja relativističke korekcije reda v^2/c^2 i viših redova. Sve one nestaju u strogom nerelativističkom limesu $v^2/c^2 \to 0$.

Na prvi pogled osobito bode oči to da kad masena čestica miruje, pa zbog $p = 0$ ima beskonačnu de Broglievu valnu duljinu, zbog energije mirovanja $E_0 = mc^2$ ipak na neki način oscilira de Broglievom frekvencijom $\omega_0 = mc^2/\hbar$. Nasuprot tome, fotonu prirodno iščezavaju i energija i impuls kada $\lambda \to \infty$ odnosno (sasvim ekvivalentno) $\nu \to 0$, u kojem slučaju foton niti ne postoji.

Ipak, svi se ti prigovori ispostavljaju kao površni, jer de Broglieva hipoteza ima snažno uporište u činjenici da je karakteristični oblik faze (6.7) – o kojoj ovise putujući valovi i u elektromagnetskom i u de Broglijevom slučaju – relativistički invarijantan, bez obzira je li u relaciji (6.25) između energije i impulsa $m = 0$ ili $m > 0$.

Naime, inercijalne referentne sustave $\{x, t\}$, te $\{x', t'\}$ koji se giba konstantnom brzinom u relativno prema prvom, povezuju relativističke Lorentzove transformacije (tzv. "potisci") prostorno-vremenskih koordinata, ali i energije i impulsa (ili ekvivalentno, frekvencije $\omega = E/\hbar$ i valnog broja odnosno inverzne valne duljine $k = p/\hbar = 1/\lambda\!\!\!^{-}$):

$$t' = \gamma_u(t - \frac{u}{c^2}x)\,,\; x' = \gamma_u\,(x - ut)\;,\; E' = \gamma_u\,(E - up)\;,\; p' = \gamma_u(p - \frac{u}{c^2}E) \quad (6.27)$$

gdje $\gamma_u = 1/\sqrt{1 - u^2/c^2}$.

Faza (6.7), tj. argument i ravnih "valova materije" (6.8) i elektromagnetskih valova poput (2.11), simetrična je na Lorentzove transformacije (6.27) jer se pod njima ne mijenja (invarijantna je):

$$\phi'(x', t') = \frac{E'\,t' - p'\,x'}{\hbar} = \omega'\,t' - k'\,x' = \omega\,t - k\,x = \frac{E\,t - p\,x}{\hbar} = \phi(x, t)\,, \quad (6.28)$$

bez obzira radi li se o masivnom ili bezmasenom kvantonu, to jest, bez obzira ima li m u (6.25) vrijednost nula ili ne.

To će nam pružiti simetrijski argument u prilog de Broglieve hipoteze, koju smo u prethodnim sekcijama uzimali kao nešto što je prihvaćeno jer su ju potvrdili eksperimenti, ali koja je prije toga bila iznesena kao intuitivna spekulacija bez pravih fizikalnih argumenata. Međutim, de Brogliea je najviše motivirala simetrija invarijantnosti oblika na relativističke transformacije, što ćemo skicirati u sljedećim odlomcima (naravno, pročišćeno od de Broglieve zablude da i foton ima masu, iako tako malenu da ju (bar tadašnji) pokusi nisu mogli detektirati).

Za *bezmaseni* kvanton, naime foton, već znamo da je Lorentz-simetrična ("Lorentz-invarijantna") prostorno-vremenska kombinacija energije i impulsa $E\,t - p\,x$ ključna za širenje, kroz prostor i vrijeme, elektromagnetskih valova poput (2.11), jer eto predstavlja fazu ravnog vala upravo zbog Planck-Einsteinovih vezâ $E = \hbar\omega$ i $p = \hbar k$, koje smo prihvatili već u prva četiri poglavlja.

No vidimo da je ista ta kombinacija $E\,t - p\,x$ potpuno jednako simetrična (invarijantna) na Lorentzove transformacije i onda, kada su E i p energija i linearni impuls *masivnih* čestica. Ta simetrija snažno sugerira da kombinacija $E\,t - p\,x$ igra ulogu u širenju kroz prostor i vrijeme tih masivnih kvantona, koja je analogna njenoj ulozi u širenju fotona. To jest, ta simetrija sugerira da (6.28) bude faza (i) nekakvih valova asociranih s masivnim kvantnim česticama, kao što to i jesmo stavili u ravnom valu (6.8), ili pak u (6.21) ako radimo u tri prostorne dimentije.

Međutim, za to je potrebno da i za masivne čestice vrijede relacije $E = \hbar\omega$ i $p = \hbar k$, što i jest de Broglieva hipoteza.

Dakle, vidimo da za de Broglievu hipotezu postoji uvjerljiva motivacija ako se zahtijeva simetrija na Lorentzove transformacije specijalne teorije relativnosti. A jasno je da je taj zahtjev utemeljen, jer znamo da je ta simetrija fundamentalna; u odnosu na nju je simetrija na "obične" Galileieve transformacije samo aproksimativna, te primjenjiva u granici malih brzina, $v/c \approx 0$.

6.4 Zadaci 6

6.1.) Izvedite izraz za $r_{\texttt{MIN}}$ u (6.4).

6.2.) Pomoću izraza za $r_{\texttt{MIN}}$ u (6.4) i koristeći uvjet za postojanje stojnog vala na kružnici, pokažite da $E_n = -mc^2\,\alpha/(2n^2)$.

6.3) Počni od točne, općenite relativističke veze između energije $E = E_{\rm rel}$, impulsa i mase, pa nađi izraze za de Broglievu valu duljinu $\lambda = h/p$ u općenitom slučaju, te u ultrarelativističkoj i u nerelativističkoj granici.

Rješenje:

Općenito je energija čestice relativistička, naime (4.4):

$$E \equiv E_{\rm rel} = c\sqrt{(mc)^2 + \boldsymbol{p}^2}\ , \tag{6.29}$$

pa poseban slučaj $m = 0$ kao kod fotona (γ) lako daje poznate relacije $E_\gamma = cp = ch/\lambda = h\nu = \hbar\omega$, te $\lambda = c\tau = c/\nu = h/p \iff \lambda\!\!\!^{-} = c/\omega = 1/k$.

To jest, u bezmasenom slučaju, de Broglieva valna duljina jednaka je uobičajenoj valnoj duljini elektromagnetskog zračenja.

U općenitom slučaju (6.29) $E = E_{\rm rel}$ daje

$$c^2\,\boldsymbol{p}^{\,2} \equiv c^2\,p^2 = E_{\rm rel}^2 - (mc^2)^2 = (E_{\rm rel} - mc^2)(E_{\rm rel} + mc^2) \tag{6.30}$$

zbog čega

$$p \equiv |\boldsymbol{p}| = \frac{1}{c}\sqrt{E_{\rm rel} - mc^2}\,\sqrt{E_{\rm rel} + mc^2} \equiv \frac{h}{\lambda}\ . \tag{6.31}$$

Odatle je općeniti izraz za de Broglievu valnu duljinu dat preko mase i općenite energije čestice

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{E_{\rm rel} - mc^2}\,\sqrt{E_{\rm rel} + mc^2}} \tag{6.32}$$

U ultrarelativističkom limesu je energija mirovanja nula ili zanemariva u odnosu na ostatak, $E_0 = mc^2 \approx 0$, pa gornji izraz postaje $\lambda = hc/E_{\rm rel}$. To je opet isto što i gornji slučaj fotona, što vidimo kad uvrstimo $E_{\rm rel} = E = h\nu$.

Ako $m > 0$, možemo izlučiti energiju mirovanja $m\,c^2$, te ju izdvojiti iz ukupne energije:

$$E \equiv E_{\rm rel} = c\sqrt{(m\,c)^2 + \boldsymbol{p}^2} = mc^2\sqrt{1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{m^2c^2}} \equiv m\,c^2 + E_{\rm kin}\,. \quad (6.33)$$

Ono što ostane nakon izdvajanja energije mirovanja $mc^2 \equiv E_0$, nazivamo kinetičkom energijom $E_{\rm kin}$. Ona se može jako razlikovati od nerelativističke kinetičke energije T ako je impuls p velik, $p \gtrsim mc$. Međutim, nas zanima baš obratni režim, $p << m\,c$. Tada je dovoljno korijen razviti do par najnižih potencija:

$$E_{\rm kin} = E_{\rm rel} - mc^2 = mc^2\left(1+\frac{1}{2}\frac{\boldsymbol{p}^2}{m^2c^2}+\frac{1}{8}\frac{\boldsymbol{p}^4}{m^4c^4}+\,...\right) - mc^2\,. \quad (6.34)$$

Zbog $m > 0$, možemo pisati $\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}/\sqrt{1-v^2/c^2}$ ($\approx m\boldsymbol{v}$ u nerelativističkom limesu), pa uvrštavanjem i oduzimanjem energije mirovanja mc^2 slijedi

$$E_{\rm kin} = \frac{p^2}{2\,m} + ... = \frac{m\,v^2}{2\,(1-\frac{v^2}{c^2})} + ... = \frac{m\,v^2}{2} + \mathcal{O}(\frac{v^2}{c^2}) \equiv T \quad (6.35)$$

gdje $\mathcal{O}(\frac{v^2}{c^2})$ predstavlja relativističke korekcije reda v^2/c^2 i viših redova. Sve one nestaju u strogom nerelativističkom limesu $v^2/c^2 \to 0$.

Općeniti izraz (6.32) se zbog razdvajanja u (6.33) najprije piše

$$\lambda = \frac{h\,c}{\sqrt{E_{\rm kin}}\,\sqrt{2\,mc^2 + E_{\rm kin}}} \approx \frac{h}{\sqrt{2\,m\,E_{\rm kin}}} \quad (6.36)$$

a potom smo u zadnjoj aproksimaciji $E_{\rm kin}$ ostavili kao faktor, ali kao pribrojnik zanemarili u odnosu na $2\,mc^2$.

U strogom nerelativističkom limesu, gdje sve korekcije $\mathcal{O}(v^2/c^2)$ iščezavaju, $E_{\rm kin} = T = p^2/2m = mv^2/2$ egzaktno. Gornja relacija time postaje

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\,m\,T}} = \frac{h}{m\,v} = \frac{h}{p}\,. \quad (6.37)$$

Taj izraz za de Broglievu valnu duljinu je potpuno konzistentan s njenom definicijom (6.31) preko iznosa impulsa u općenitom relativističkom režimu.

Zaključujemo da se taj koncept i formula $\lambda = h/p$ može koristiti konzistentno u svim kinematičkim režimima, to jest i u relativističkoj i u nerelativističkoj kvantnoj mehanici.

6.4.) Pokažite da ako kinetičku energiju T u (6.37) izražavamo u elektonvoltima (eV), onda je de Broglieva valna duljina elektronâ u Ångströmima približno data formulom

$$\lambda = \sqrt{\frac{150}{T}} \text{ Å} .$$

Kako bi glasila formula koja bi λ izražavala u nanometrima?

6.5.) Razmotrite granicu $u/c \to 0$ i obrazložite kako se iz transformacije Lorentzovih potisaka (6.27) iz jednog u drugi inercijalni sustav u relativnom gibanju, izvode odgovarajuće Galileijeve transformacije.

6.6.) Nađite de Broglieve valne duljine: (a) α-česticâ u Rutherfordovom raspršenju, uz tipične nerelativističke kinetičke energije od 4 MeV do 6 MeV, te (b) elektrona u osnovnom stanju vodikovog atoma.

Obrazložite zašto su se u opisu i objašnjenju Rutherfordovog eksperimenta mogle uspješno koristiti oštro određene klasične staze α-česticâ, dok su se pokazale promašenima njima analogne oštro određene staze elektrona u Bohrovom modelu.

Rješenje:

(a) Nerelativistički izraz (6.37) daje de Broglievu valnu duljinu $\lambda \approx 7.2$ fm $= 7.2 \cdot 10^{-15}$ m za α-česticu kinetičke energije 4 MeV, a oko 5.9 fm za α-česticu kinetičke energije 6 MeV. Znači, obje su de Broglieve valne duljine reda veličine jezgre zlata, a nekoliko *desetaka tisuća* puta manje od veličine atoma. Dakle, *u usporedbi s veličinom atoma* čija se struktura istraživala Rutherfordovim raspršenjem, kretanje α-česticâ tako malih de Broglievih valnih duljina dobro je opisano kretanjem po oštro određenim (klasičnim) stazama.

(b) Elektron je u vodikovom atomu nerelativistički čak i u najdublje vezanom, osnovnom stanju, jer je kinetička energija $T = p^2/2m_e = -E_1 = 13.6$ eV $<< m_e c^2$. Izraz (6.37) tada daje de Broglievu valnu duljinu elektrona

$\lambda \approx 3.3$ Å. To je čak veće od vodikovog atoma (promjera oko 1 Å). Zato je valna priroda tu bitna, a oštro određena putanja kao što je Bohrova orbita je očito neadekvatna.

6.7.) Iz klasične fizike, na primjer iz klasičnog elektromagnetizma, dobro je poznato da kraćim valnim duljinama postižemo preciznije razlučivanje. I obratno, moć razlučivanja pada povećanjem valnih duljina elektromagnetskih (a i drugih, primjerice ultrazvučnih) valova koje možemo koristiti za promatranje objekata. Razmotrite kako bi se analogna razmatranja primijenila na de Broglieve valove, te pokažite da tako možemo dobiti grubu (ranu) verziju tzv. Heisenbergovih relacija neodređenosti (9.57).

Rješenje:

Položaj čestice označimo Kartezijevom koordinatom x, jer nam je za početak dovoljno ograničiti se na jednu dimenziju. Tada i vektor impulsa čestice ima samo komponentu p_x duž osi x. Dolje simbol " $\sim$" znači "procjena po redu veličine".

Već je iz klasičnih razmatranja jasno da ne možemo razlučiti položaj klasičnog objekta preciznije od, otprilike, valne duljine λ valova (na pr. vidljive svjetlost) kojima promatramo (lociramo) taj objekt, na pr. klasičnu česticu, tj. materijalnu točku na položaju x. Dakle, postoji *neodređenost* $\Delta x \sim \lambda$ u određivanju tog položaja x. Zato tu neodređenost očito možemo smanjiti jednostavno tako da smanjimo valnu duljinu λ, jer time postižemo bolje razlučivanje. Kod klasičnih, makroskopskih objekata takva određivanja (mjerenja) njihovog položaja ne utječu na impuls objekta $p_x = mv_x$. Dakle, u principu ga možemo ga mjeriti s proizvoljnom točnošću, pa su samo praktični eksperimentalni problemi prepreka smanjenju na nulu neodređenosti impulsa Δp_x. Znači, točnost istovremenog određivanje položaja i impulsa *klasične* čestice nije ograničena.

Drugačija je situacija kod kvantnih čestica, jer su to mikro-čestice pa im je masa dovoljno mala da mjerenje položaja utječe na njihov impuls $p_x = mv_x$. Vidjet ćemo da zato ne možemo niti u principu *istovremeno* odrediti položaj i impuls do proizvoljne točnosti, tj. smanjiti istovremeno i Δx i Δp_x bez ograničenja.

Recimo da taj masivni kvanton, primjerice elektron, želimo "gledati" tj. odrediti mu položaj x tako što ćemo na njemu raspršivati elektromagnetske valove – dakle, u kvantnom kontekstu, fotone. Ako im smanjimo valnu duljinu λ_γ da bismo smanjili neodređenost Δx izmjerenog položaja masivne kvantne čestice, povećat ćemo impuls fotona h/λ_γ. On se raspršenjem može u cjelosti prenijeti na masivnu česticu. Stoga je njena neodređenost impulsa data s $\Delta p_x \sim h/\lambda_\gamma$. Dakle, Δp_x se povećava kada smanjenjem valne duljine fotona λ_γ smanjujemo neodređenost položaja elektrona Δx, pa *umnožak* te dvije neodređenosti ostaje procijenjen Planckovom *konstantom*:

$$\Delta x \, \Delta p_x \sim h \,. \tag{6.38}$$

(Dakle, produkt neodređenostî položaja i impulsa može se neograničeno smanjivati samo u klasičnoj granici $h \to 0$.)

Isto nalazimo ako pokušamo upotrijebiti neku drugu metodu. Primjerice, elektronima možemo mjeriti položaje i tako da registriramo njihove udare u raznim točkama nekog detektora (recimo scintilacijskog zaslona od cinkovog sulfida). Sada de Broglieva valna duljina elektrona daje procjenu njegove neodređenosti položaja Δx: elektroni koji imaju de Broglievu valnu duljinu λ bit će detektirani u raznim točkama rasutim po intervalu širine $\Delta x \sim \lambda$. No i njihov je impuls dat tom valnom duljinom: $p_x = h/\lambda$. Prilikom sudara sa zaslonom, moguće je njegova promjena; može se izgubiti ili čak obrnuti smjer, $p_x \to -p_x$. U svakom slučaju, procjena neodređenosti impulsa je $\Delta p_x \sim h/\lambda$, te promjena λ djeluje na Δp_x točno obratno nego na Δx, tako da opet dobivamo "grubi oblik" (6.38) Heisenbergove relacije neodređenosti (koja u preciznijem obliku (9.57) glasi $\Delta x \, \Delta p_x \geq \hbar/2 = h/(4\pi)$).

Naravno, u tri dimenzije sve to možemo ponoviti i za ostale nezavisne smjerove, te dobiti analogno

$$\Delta y \, \Delta p_y \sim h \qquad \text{i} \qquad \Delta z \, \Delta p_z \sim h \,. \tag{6.39}$$

(Kada budemo dulje raspravljali samo u jednoj dimenziji, pojednostavnit ćemo notaciju ispuštanjem oznake komponente, $p_x \equiv p$, $\Delta p_x \equiv \Delta p$.)

6.8.) Da biste dopunili uvid iz Zadatka 6.6, usporedite što Heisenbergove relacije neodređenosti kažu o neodređenosti impulsa, neodređenosti brzine $\Delta v = \Delta p/m$, te kinetičke energije u slučaju elektrona i u slučaju α-čestice

ako im je položaj izmjeren do na točnost od 0.1 Å i 0.01 Å(dakle, oko desetine i oko stotnine promjera atoma vodika).

a) Učinite to za "grubu" relaciju neodređenosti (6.38), te

b) za relaciju neodređenosti (9.57) gdje ne samo da je desna strana $\hbar/2 = h/(4\pi)$ umjesto h, nego relacija $\Delta x\,\Delta p$ s njom nije "procjena po redu veličine", $\sim$, nego $\geq$. Usporedite s dijelom a).

6.9.) Pokažite da iz Heisenbergovih relacija neodređenosti nužno slijedi stabilnost atomâ.
(**Uputa**: Radite po analogiji s podsekcijom **6.1.1 de Broglieva valna duljina i stabilnost kvantnih sustava**, gdje se zahvaljujući postojanju prostorne skale λ elektrona i njene veze s impulsom čestice, njegova ukupna energija (6.3) minimizirala na konačnoj udaljenosti od jezgre.)

Poglavlje 7

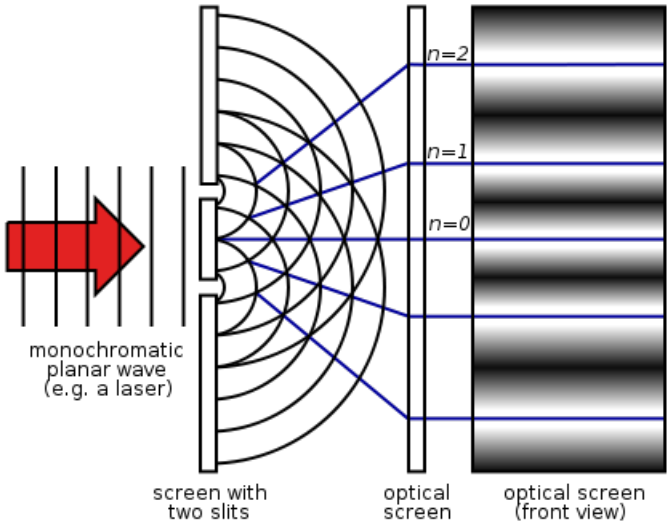
Eksperimenti kažu: kvantni valovi su valovi vjerojatnosti, a njihove jednadžbe su linearne

7.1 Eksperimenti s kvantnim česticama pokazuju interferenciju valova s de Broglieovim valnim duljinama

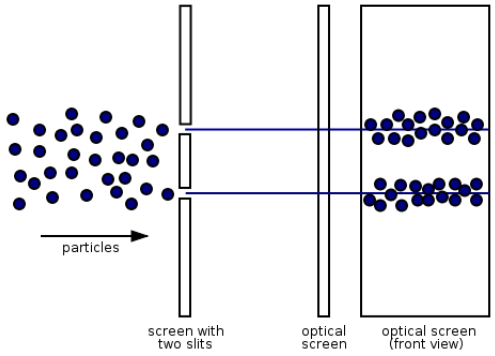
Kao što smo izložili u Poglavlju 6, godine 1923. je de Broglie iznio hipotezu (i njome doktorirao 1924.) da ne samo fotoni nego *sve* kvantne čestice ("kvantoni", "mikro-čestice") imaju (i) valnu prirodu. Ona se kvantitativno izražava preko njihove frekvencije ν i valne duljine λ, odnosno preko kružne frekvencije ω i valnog broja k. Sve su te veličine povezane s energijom E i s linearnim impulsom p **istim formulama** kao i kod fotona:

$$E = h\,\nu \equiv \hbar\,\omega\ , \quad p = \hbar\,k\ , \quad \text{te} \quad |p| = \frac{h}{\lambda} = \hbar\,\frac{2\pi}{\lambda} \equiv \frac{\hbar}{\lambda\!\!\!^{-}} = \hbar\,|k|\ , \quad (7.1)$$

gdje je Planckova konstanta $h = 6.62607015 \times 10^{-34}$ J s, a tzv. *reducirana* Planckova konstanta $\hbar \equiv h/(2\pi) = 1.054571817 \times 10^{-34}$ J s $= 6.582119569 \times 10^{-22}$ MeV s, i gdje smo (u ovom slučaju) pedantno označili apsolutne vrijednosti (module) kod linearnog impulsa p i valnog broja k, jer oni imaju i smjer, a ne samo iznos kao energija, frekvencija i valna duljina.



Slika 7.1: Je li neka pojava valna ili nije, kaže nam prisutnost odnosno odsutnost interferencije kod nje. Youngov pokus s interferencijom vidljive svjetlosti je tako još početkom XIX stoljeća pokazao da je svjetlost valna pojava. Ovdje je prikazan u modernoj verziji gdje svjetlost interferira nakon prolaska kroz dva proreza (toliko uska da se može zanemariti ogib na svakom od njih). To znači da interferentni član (7.11) $G_{\text{fer}}^{\text{inter}} \neq 0$, pa ukupni intenzitet G (7.10) *nije* zbroj pojedinačnih intenzitetâ porijeklom iz prorezâ 1 i 2: $G \neq G_1 + G_2$.
Izvor: inductiveload - Public Domain, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=1663904



Slika 7.2: Klasične čestice ne pokazuju interferenciju. U svakoj točki detektorskog zaslona, broj čestica je zbroj čestica pristiglih iz proreza 1 i iz proreza 2. Tome je proporcionalan i intenzitet (gustoća) G, pa je i on običan zbroj onog što potječe iz proreza 1 i proreza 2: $G = G_1 + G_2$.
Izvor: inductiveload - Public Domain, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=1663917

Naravno, kod masivnih kvantona, veza između frekvencije i valne duljine **nije** $\lambda = hc/E = c/\nu$ kao kod fotona (osim približno u slučaju da su im brzine v bliske brzini svjetlosti, $v \approx c$, pa $E >> mc^2$ toliko da $mc^2/E \approx 0$). Nego, zbog $E^2 = p^2\,c^2 \,+\, (m\,c^2)^2$ (8.59), $m > 0$ u $\lambda = h/|p|$ daje

$$\lambda \,=\, \frac{h\,c}{\sqrt{E - m\,c^2}\,\sqrt{E + m\,c^2}} \,=\, \frac{h\,c}{\sqrt{E_{\rm kin}}\,\sqrt{2\,mc^2 + E_{\rm kin}}} \,\approx\, \frac{h}{\sqrt{2\,m\,E_{\rm kin}}}\,, \quad (7.2)$$

gdje smo pretpostavili slobodne čestice, bez interakcije, pa $E = E_{\rm kin} + mc^2$. Zadnja aproksimacija u (7.2) je nerelativistička, jer pretpostavlja kinetičku energiju $E_{\rm kin}$ znatno manju od energije mirovanja, $E_{\rm kin} << 2\,mc^2$.

Mase mirovanja $m > 0$ jako skraćuju de Broglieve valne duljine (7.2) u odnosu na one bezmasenih čestica (konkretno, fotona). Doduše, kada im je $m > 0$, čestice mogu i mirovati, tj. imati brzinu i impuls nula, a $v = 0 = p$ daje $\lambda = \infty$, no ta je granica varljiva. Jer, već kod *relativno* malenih brzina, $v/c << 1$, kada u dobroj aproksimaciji pretpostavljamo *striktno* nerelativističku kinetičku energiju $E_{\rm kin}$,

$$E_{\rm kin} \,=\, T \,=\, \frac{p^2}{2m} \,=\, \frac{mv^2}{2}\,, \qquad \text{pa} \qquad \lambda \,=\, \frac{h}{|p|} \,=\, \frac{h}{mv}\,, \quad (7.3)$$

čak i elektron, tj. kvanton s najmanjom poznatom masom $m > 0$, ima znatno manju de Broglievu valnu duljinu (7.2) od valova (odnosno fotona) vidljive svjetlosti. Zato je kod njih znatno teže ustanoviti interferenciju nego kod klasičnih valova, poput interferencije vidljive svjetlosti u Youngovom eksperimentu, shematski prikazanom na Slici 7.1. Naime, budući da su valne duljine vidljive svjetlosti ($\lambda \in [0.4, 0.8] \cdot 10^{-6}$ m) oko 10000 puta veće od de Broglievih valnih duljinâ (7.2) elektronâ kinetičke energije $E_{\rm kin} \sim 1$ keV, veličina proreza i njihovih razmaka za pokus interferencije elektronâ (kao i elektromagnetskih X-zraka) mora biti mnogo manja nego za vidljivu svjetlost. Tako nešto je teško načiniti umjetno, pa su se u Davisson-Germerovom, G.P. Thomsonovom i sličnim pokusima (20ih i 30ih godina XX stoljeća) koristili kristali kao prirodne ogibne rešetke, dok se pokusi s interferencijom kvantnih čestica tako malih (sada doduše još i nekoliko redova veličina manjih) valnih duljinâ na dva proreza izvode tek od zadnje trećine XX stoljeća. Međutim, **interferentni uzorci** kao na Slikama 7.3 i 7.4, i to **uvijek u skladu s odgovarajućim de Broglievim valnim duljinama**, sada se tako dobivaju ne samo za fotone i elektrone, te protone, neutrone, jezgre i atome, nego i za molekule – pa čak i za molekule s više tisuća atoma, dakle za objekte čije veličine iz mikro-skalâ pomalo prelaze u mezo-skale.

7.2 Kvantone detektiramo kao pojedinačne čestice, pa je nužna Bornova interpretacija

U drugoj polovici XX stoljeća uspjeli su se načiniti i izvori fotona, elektrona i drugih kvantnih čestica (kvantona), tako niskog intenziteta da su se one mogle detektirati pojedinačno. To je dovelo do eksperimentalnih opažanja kao na Slikama 7.3 i 7.4: svaki kvanton je detektiran kao čestica, ali kad ih ima mnogo, stvaraju interferentnu sliku kao val de Broglieve valne duljine (7.2) u skladu s impulsom (odnosno masom i energijom) čestice.

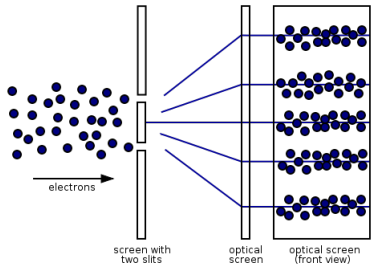
Govoreći kvantitativno, intenzitet na interferentnim slikama dat je apsolutnim kvadratom, $|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2$, kompleksne valne funkcije $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ dobivene rješavanjem odgovarajuće Schrödingerove jednadžbe, koju smo predložili u prethodnom poglavlju. Moguća stanja kvantnog objekta data su rješenjima $\Psi(\boldsymbol{r},t)$, koja se zato nazivaju i *funkcije stanja*. No to nisu valovi gustoće mase, a ni gustoće naboja (kao što je u početku smatrao Schrödinger), jer izdvojeno detektiranje svake pojedine kvantne čestice (kao na Slici 7.4) pruža direktnu potvrdu za Bornovu **vjerojatnosnu**, statističku interpretaciju valne funkcije $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ kao **amplitude vjerojatnosti**.

Naime, za sve te kvantne čestice se ustanovilo da u detektore dolaze pojedinačno, kao individualni i cjeloviti predstavnici svake pojedine vrste, s cijelom masom i nabojem kakvi karakteriziraju datu vrstu čestica, te s energijom i impulsom s kakvom su napustili izvor. Uvijek su u nekoj točki detektirane cijele kvantne čestice, ili nisu detektirane uopće. Zato se ne može raditi o valovima po prostoru raspodijeljene, "razmazane" gustoće mase ili naboja. Međutim, interferentna se slika pojavljuje ili kad je mnogo kvantona prisutno odjednom ili kad se tokom vremena akumuliraju podaci o mnogo kvantona. Dakle, valna funkcija kvantona odnosi se na njihovo statističko ponašanje.

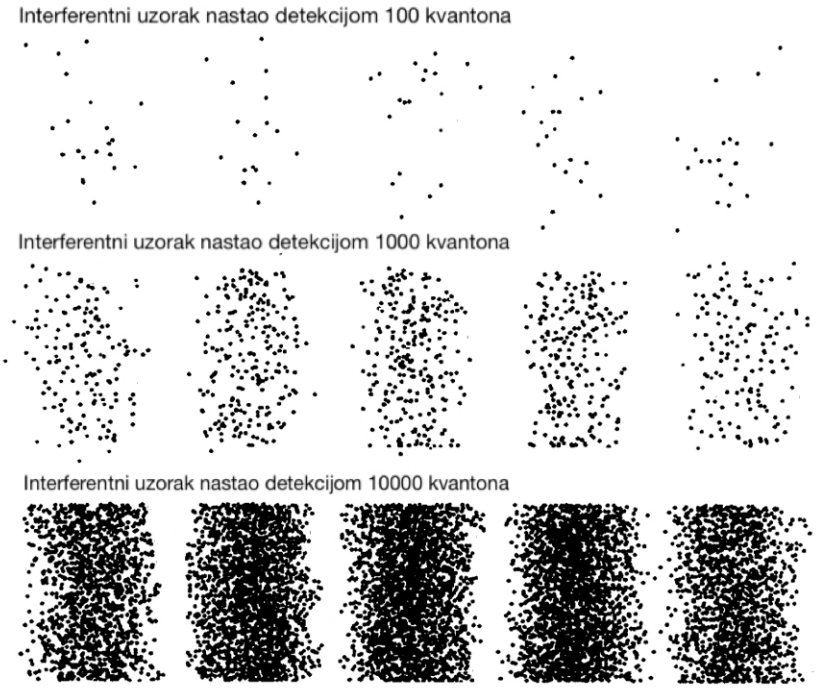
U skladu s eksperimentalnim podacima tog tipa, iako nešto indirektnijim, Max Born je još 1927. predložio da je $|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ **gustoća vjerojatnosti** $G(\boldsymbol{r},t)$ za nalaženje na položaju $\boldsymbol{r}$, u času t, one kvantne čestice čije stanje je opisano valnom funkcijom $\Psi(\boldsymbol{r},t)$:

$$G(\boldsymbol{r},t) = |\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2 = \Psi(\boldsymbol{r},t)^*\,\Psi(\boldsymbol{r},t)\,. \tag{7.4}$$

Naime, diferencijal vjerojatnosti $dP(\boldsymbol{r},t)$ za nalaženje tog kvantona u infinitezimalnom inkrementu volumena $dV = d^3\boldsymbol{r} = dx\,dy\,dz$ oko položaja/točke



Slika 7.3: Suvremene eksperimentalne tehnike sada omogućuju opažanje interferentne slike kod pokusa s dva proreza i za mikro-čestice mnogo masivnije (te s mnogo kraćom de Broglievom valnom duljinom) od elektrona.
Izvor: inductiveload - Public Domain, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=1663908



Slika 7.4: Da u kvantnoj fizici imamo valove vjerojatnosti, osobito jasno pokazuje varijanta pokusa s dva proreza gdje je izvor mikro-česticâ, tj. "kvantonâ", tako niskog intenziteta, da možemo pratiti i evidentirati detekciju svakog od njih pojedinačno. Tada svaki put vidimo jedan lokalizirani bljesak na detektorskom zaslonu. Tu uvijek dolazi cijeli kvanton (elektron, proton, foton, neka jezgra, itd.) sa cijelom svojom energijom, masom, eventualno nabojem, itd. Međutim, kad ih se *s vremenom* akumulira mnogo, stvore interferentni uzorak u skladu s odgovarajućom de Broglievom valnom duljinom; a takav se isti (u statističkom smislu isti) interferentni uzorak stvara *odmah* ako *odjednom* pustimo *mnogo* takvih kvantona, iz izvora većeg intenziteta.

$\boldsymbol{r} = (x, y, z)$, treba da je proporcionalan i tom volumenu, i "intenzitetu" $|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2$ funkcije stanja kvantona u toj točki. Zato $dP(\boldsymbol{r}, t) = |\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 \, dV$. No s druge strane,

$$dP(\boldsymbol{r}, t) \, = \, \frac{dP(\boldsymbol{r}, t)}{dV} \, dV \, \equiv \, G(\boldsymbol{r}, t) \, dV \, , \tag{7.5}$$

tako da zaista slijedi relacija (7.4) za *gustoću* vjerojatnosti $G(\boldsymbol{r}, t)$, koja je veličina neovisna o volumenu, data apsolutnim kvadratom valne funkcije $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$, koja pak ima ulogu **amplitude vjerojatnosti**.

Uočimo bitnu razliku između gustoće vjerojatnosti nalaženja kvantne čestice $G(\boldsymbol{r}, t)$ i gustoće naboja $\rho(\boldsymbol{r}, t)$. Međutim, ako kvantna čestica nosi naboj q (na pr. $q = -e$ za elektron) i ako imamo ansambl od *mnogo* takvih čestica koje sve opisuje valna funkcija $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ s gustoćom vjerojatnosti normiranom (7.13) na 1, u statističkom smislu imamo *efektivnu* gustoću naboja

$$\rho_{ef}(\boldsymbol{r}, t) \, \equiv \, q \, |\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 \, = \, q \, G(\boldsymbol{r}, t) \, . \tag{7.6}$$

To nam ilustrira donji dio Slike 7.4 gdje imamo mnoštvo kvantnih čestica.

Bornovom se interpretacijom mogu objasniti, uza sve ostale dosadašnje kvantne eksperimente, i pokusi s interferencijom kroz dva proreza, izloženi na Slikama 7.1–7.4. Tu lako objasnimo detektiranu interferentnu sliku. Ona ukazuje da se radi o valnoj pojavi, jer **kod valova se zbrajaju amplitude**. Naravno, konfiguracija s dva proreza, koji daju samo dvije superponirajuće amplitude Ψ_1 i Ψ_2, samo su najjednostavniji primjer. Ukupna amplituda Ψ može biti rezultat superpozicije doprinosa iz proizvoljnog broja izvorâ (prorezâ ili nečeg drugog),

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) \, = \, \Psi_1(\boldsymbol{r}, t) + \Psi_2(\boldsymbol{r}, t) + \Psi_3(\boldsymbol{r}, t) + ... + \Psi_n(\boldsymbol{r}, t) + ... \, , \tag{7.7}$$

pa čak i kontinuiranog mnoštva doprinosa (kada suma (7.7) postaje integral - vidi (10.7)). Ako ukupnu amplitudu Ψ (7.7) apsolutno kvadriramo (7.4),

$$|\Psi|^2 \, = \, |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + ... + |\Psi_n|^2 + ... + ... + \texttt{KRIŽNI ČLANOVI} \, , \tag{7.8}$$

uz apsolutne kvadrate pojedinih doprinosa dobivamo i sve moguće njihove `KRIŽNE ČLANOVE` oblika $\Psi_n^* \Psi_{n'} + \Psi_n \Psi_{n'}^*$, $n \neq n'$. Oni daju **valni fenomen interferencije**. On se očito vrlo brzo komplicira s povećanjem broja doprinosa, pa ćemo ga detaljno proučiti na najjednostavnijem primjeru, naime upravo **na konfiguraciji sa samo dva proreza**.

Tada se ukupna amplituda/valna funkcija (7.7) svodi na zbroj amplitude/valne funkcije koja je došla iz proreza 1 i one koja je došla iz proreza 2:

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) \,=\, \Psi_1(\boldsymbol{r},t) + \Psi_2(\boldsymbol{r},t)\,, \tag{7.9}$$

pa u točkama gdje $\Psi_1(\boldsymbol{r},t) = -\Psi_2(\boldsymbol{r},t)$ imamo maksimalno destruktivnu interferenciju, $\Psi(\boldsymbol{r},t) = 0$, te naravno intenzitet/gustoću (7.4) nula. Tome je suprotnost $\Psi_1(\boldsymbol{r},t) = \Psi_2(\boldsymbol{r},t)$, pa gdje god je tako, imamo maksimalno konstruktivnu interferenciju, $\Psi(\boldsymbol{r},t) = 2\,\Psi_1(\boldsymbol{r},t)$, te $G(\boldsymbol{r},t) = 4\,G_1(\boldsymbol{r},t)$.

Pretpostavljamo da (7.9) vrijedi u svakoj točki $\boldsymbol{r}$ i času t, pa tu ovisnost do daljnega ne pišemo eksplicite u sljedećem, općenitijem računu ukupnog intenziteta (gustoće vjerojatnosti) superpozicije dva vala:

$$\begin{aligned} G \,=\, |\Psi|^2 \;&=\; |\Psi_1 + \Psi_2|^2 \,=\, (\Psi_1 + \Psi_2)(\Psi_1 + \Psi_2)^* \\ &=\; |\Psi_1|^2 \,+\, |\Psi_2|^2 \,+\, \Psi_1^*\Psi_2 + \Psi_1\Psi_2^* \\ &=\; G_1 + G_2 + 2\,\mathfrak{Re}(\Psi_1\Psi_2) \,\equiv\, G_1 + G_2 + G_{\text{fer}}^{\text{inter}}\,. \end{aligned} \tag{7.10}$$

Kod klasičnih česticâ, obično zbrajanje čestica iz izvorâ (prorezâ) 1 i 2 daje da je u svakoj točki njihov ukupni broj/intenzitet/gustoća naprosto $G = G_1 + G_2$. No kod valova, zbrajanje amplituda (7.9) daje i dodatni, interferentni član $G_{\text{fer}}^{\text{inter}}$ u ukupnom intenzitetu/gustoći (7.10).

Osim valne prirode, eksperimentalne potvrde interferencije (tj. učinke interferentnog člana) u ukupnom intenzitetu (7.10) pokazuju i to, da valna jednadžba za amplitude Ψ, Ψ_1 i Ψ_2 mora biti linearna (kao što su na pr. i Maxwellove jednadžbe linearne). Naime, da bi se dobila relacija (7.10), nužno je najprije relacijom (7.9) zbrojiti amplitude Ψ_1 i Ψ_2 u ukupnu amplitudu Ψ. No, relacija (7.9) vrijedi za rješenja **linearne** jednadžbe (što Schrödingerova jednadžba naravno jest).

Interferentni član izražavamo jasnije ako kompleksne valne funkcije prikažemo kao produkt apsolutne vrijednosti i faznog faktora, $\Psi_j \,=\, |\Psi_j|\,e^{\mathrm{i}\delta_j} \,=\, \sqrt{G_j}\,e^{\mathrm{i}\delta_j}$ $(j = 1, 2)$. Tu treba imati na umu da ne samo $|\Psi_j|$ nego i faze δ_j ovise o razlici položaja $\boldsymbol{r}$ i položaja j-tog proreza. Stoga promjenom položaja detekcije $\boldsymbol{r}$, zadnji član u (7.10), naime interferentni član

$$G_{\text{fer}}^{\text{inter}} \,=\, |\Psi_1|\,|\Psi_2|\,\left(\,e^{\mathrm{i}(\delta_1-\delta_2)} + e^{-\mathrm{i}(\delta_1-\delta_2)}\right) \,=\, 2\sqrt{G_1\,G_2}\,\cos(\delta_1 - \delta_2)\,, \tag{7.11}$$

postaje $+2\sqrt{G_1\,G_2}$ te daje maksimalnu konstruktivnu interferenciju na mjestima gdje $\cos(\delta_1 - \delta_2) = +1$, tj. gdje je razlika faza nula ili parni cijeli broj,

$\delta_1 - \delta_2 = 2n\pi\,,\ n \in \mathbb{Z}\,.$ Mjesta maksimalne destruktivne interferencije su pak tamo gdje $G_{\text{fer}}^{\text{inter}} = -2\sqrt{G_1\,G_2}$ zbog $\cos(\delta_1 - \delta_2) = -1\,,$ tj. gdje je razlika faza neparni cijeli broj, $\delta_1 - \delta_2 = 2(n + \frac{1}{2})\pi\,.$

Ovo razmatranje objašnjava ne samo interferentnu sliku kod Youngovog pokusa s valovima koje možemo smatrati klasičnim, nego i Slike 7.3 i 7.4 kod pokusa s kvantnim česticama gdje vidimo ne samo interferenciju nego i zrnatost slike. Naravno, ako podrazumijevamo Bornovu interpretaciju da je (obično glatka) valna funkcija Ψ amplituda/val raspodjele *vjerojatnosti*. Ako je $N(x)$ broj kvantona detektiranih u točki x na zaslonu, a N_{ukupni} ukupni broj kvantona pristiglih na cijeli detektorski zaslon tokom eksperimenta, i ako Ψ ne ovisi o vremenu t (tj. ne mijenja se tokom eksperimenta),

$$\frac{N(x)}{N_{\text{ukupni}}} \to |\Psi(x)|^2 = G(x) \quad \text{kada} \quad \int_{\text{zaslon}} N(x)\,dx = N_{\text{ukupni}} \to \infty\,. \quad (7.12)$$

Naime, po teoriji vjerojatnosti, slučajni dolasci u pojedinu točku x će se u granici $N_{\text{ukupni}} \to \infty$ potpuno pokoriti prostorno glatkoj statističkoj raspodjeli vjerojatnosti $|\Psi(x)|^2$ na zaslonu, ako je eksperiment pripremljen tako da je Ψ funkcija stanja svake kvantne čestice (na pr. elektrona ili protona) u tom eksperimentu. Za razliku od Slikâ 7.3 i 7.4, u idealnoj granici $N_{\text{ukupni}} \to \infty$ nestala bi i zrnatost uzorka detektiranih kvantnih čestica, kao u slučaju Youngovog pokusa s klasičnim elektromagnetskim valovima na Slici 7.1. (No vrijedi i obratno: kad bi se vrijeme ekspozicije ili/i intenzitet izvora elektromagnetskih valova dovoljno smanjio, Slika 7.1 bi počela bivati zrnata jer bi se mogao opažati dolazak pojedinačnih fotona. Dakle, izgubio bi se klasični karakter elektromagnetskih valova.)

7.3 O normi valnih funkcija kvantnih stanja

Bornova vjerojatnosna interpretacija rješava i pitanje konstanti proporcionalnosti. Schrödingerove jednadžba, predložena u prethodnom poglavlju, homogena je i **linearna**. Zato, ako joj je $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ rješenje, onda joj je rješenje i $\mathcal{K}\,\Psi(\boldsymbol{r}, t)\,,$ gdje je $\mathcal{K}$ bilo koja konstanta. No budući da je *totalna vjerojatnost* (suma svih mogućih vjerojatnosti) jednaka 1 ("sigurnost"), **Bornova interpretacija** (7.4), osim *irelevantne* faze $e^{i\,\text{konstanta}}$, **fiksira** $\mathcal{K}$ na vrijednost $\mathcal{N}$ koju nazivamo *konstantom normiranja*. Za tu vrijednost konstantnog faktora

u funkciji $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ je integral od $G(\boldsymbol{r},t)=|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ po cijelom beskonačnom prostoru V_∞ (tj. norma $||\Psi||$ na kvadrat) normiran na 1:

$$P^{\text{tot}}_{\text{alna}}=\int_{V_\infty} dP(\boldsymbol{r},t)=\int_{V_\infty} G(\boldsymbol{r},t)\,dV=\int_{V_\infty}|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2\,d^3\boldsymbol{r}\;\equiv||\Psi||^2\;=1. \quad (7.13)$$

Ovo nazivamo uvjetom normalizacije kvantnomehaničke valne funkcije, jer se čestica, ako postoji, sigurno nalazi negdje u V_∞, pa totalna vjerojatnost $P^{\text{tot}}_{\text{alna}}=1$.

Jasno je da se ovisnost funkcije $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ o koordinati $\boldsymbol{r}$ gubi u izrazu (7.13), jer se tu preko $\boldsymbol{r}$ prointegrira. No kako se izgubi ovisnost Ψ o vremenu t, preko kojega se ne integrira? Radi se o tome da Schrödingerova jednadžba vodi do takvog vremenskog razvoja funkcije stanja Ψ koji čuva konstantnost izraza (7.13) u vremenu. Međutim, na ovom stupnju znanja to ne možemo pokazati matematičkim izvodom. Tek u idućem poglavlju, naročito od Sekcije 8.5 na dalje, dobit ćemo dovoljan uvid u vremenski razvoj valnih funkcijâ, gustoćâ vjerojatnosti i stacionarnost nekih veličina poput norme. Sada možemo samo uočiti da ako je Bornova vjerojatnosna interpretacija ispravna, onda se vremenska ovisnost amplitude vjerojatnosti Ψ mora izgubiti u izrazu (7.13), jer totalna vjerojatnost $P^{\text{tot}}_{\text{alna}}$ mora biti konstantna.

Međutim, vjerojatnost nalaženja kvantne čestice u nekom ograničenom dijelu prostora konačnog volumena $V_{\text{konačni}}=\Delta V$, općenito ovisi i o prostoru ΔV i o vremenu t, jer ovisi o tome kako se funkcija stanja $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ tamo ponaša i razvija:

$$P(\Delta V,t)=\int_{\Delta V} G(\boldsymbol{r},t)\,dV=\int_{\Delta V}|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2\,d^3\boldsymbol{r}\,. \quad (7.14)$$

Vremenska se ovisnost u (7.14) gubi samo za poseban slučaj takozvanih *stacionarnih stanja*. Jedan primjer takve valne funkcije je u Zadatku 7.1.

Budući da je vjerojatnost bezdimenzionalna, lako se vidi, na primjer iz (7.4)-(7.5) ili iz (7.13), da $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ ima dimenziju $[(duljina)^{3/2}]$. Međutim, to je očito drugačije ako radimo u prostoru drugačije dimenzionalnosti. Općenito, u prostoru dimenzionalnosti $\mathfrak{D}$, valna funkcija Ψ je dimenzije $[(duljina)^{\mathfrak{D}/2}]$. Na primjer, valne funkcije u jednodimenzionalnom prostoru očito imaju dimenziju $[(duljina)^{1/2}]$. S takvim valnim funkcijama, $\Psi(x,t)$, mnogo ćemo raditi jer se u jednodimenzionalnom prostoru lakše formuliraju jednostavne

primjene nego u višim dimenzijama. To će nam koristiti već u nastavku ovog poglavlja, jer su i formule za jednodimenzionalni prostor jednostavnije i preglednije, a ništa manje ilustrativne za objašnjenje bitnoga.

Primjerice, vjerojatnost nalaženja kvantne čestice u nekom ograničenom dijelu jednodimenzionalnog prostora je lako predočiti i zapisati kao vjerojatnost da se čestica nađe u intervalu omeđenom dvjema točkama, $x = x_1$ i $x = x_2$:

$$P([x_1, x_2], t) = \int_{x_1}^{x_2} G(x,t)\, dx = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x,t)|^2\, dx\,. \tag{7.15}$$

Nekoliko karakterističnih primjera ilustrira Zadatak 7.1) c).

7.3.1 Računanje prosječnih vrijednosti

Po teoriji vjerojatnosti, poznavanje vjerojatnosti nekih događaja omogućava izračun prosječnih vrijednosti (odnosno očekivanih vrijednosti) odgovarajućih veličina. U kontekstu kvantne valne mehanike, imamo funkcije stanja Ψ, gdje $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ ima značenje amplitude vjerojatnosti za nalaženje kvantne čestice na položaju $\boldsymbol{r}$ u čas t. Gustoća vjerojatnosti za to je (7.4), pa je $|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 d^3\boldsymbol{r}$ inkrementalna vjerojatnost za nalaženje na nekom položaju $\boldsymbol{r}$. Dakle, ako nam je za neko kvantno stanje Ψ poznata njegova valna funkcija u položajnom prostoru, $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$, možemo za to stanje izračunati očekivanu vrijednost koordinate položaja $\boldsymbol{r}$, to jest, njen prosjek po prostoru, što označavamo kutnim zagradama:

$$\langle \boldsymbol{r} \rangle_\Psi(t) \;=\; \int_{V_\infty} \boldsymbol{r}\, |\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2\, d^3\boldsymbol{r} \;=\; \int_{V_\infty} \Psi(\boldsymbol{r},t)^*\, \boldsymbol{r}\, \Psi(\boldsymbol{r},t)\, d^3\boldsymbol{r}\,. \tag{7.16}$$

To vrijedi i za svaku funkciju $f(\boldsymbol{r})$ te koordinate:

$$\langle f(\boldsymbol{r}) \rangle_\Psi(t) \;=\; \int_{V_\infty} f(\boldsymbol{r})\, |\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2\, d^3\boldsymbol{r} \;=\; \int_{V_\infty} \Psi(\boldsymbol{r},t)^*\, f(\boldsymbol{r})\, \Psi(\boldsymbol{r},t)\, d^3\boldsymbol{r}\,. \tag{7.17}$$

Primjerice, u vodikovom atomu bi valne funkcije stacionarnih stanjâ (onih s energijom E_n (5.29)) morale dati $\langle 1/r \rangle_\Psi = \langle 1/|\boldsymbol{r}| \rangle_\Psi = 1/(n^2 a_0)$ zbog (5.54).

Očite su verzije izrazâ (7.16)-(7.17) za slučaj jedne dimenzije, $\boldsymbol{r} \to x$.

7.3.2 Modifikacije uvjeta normalizacije za nevezana stanja

Matematički gledano, uvjet (7.13) da je norma funkcije $||\Psi||^2 = 1$, je (do na konačnu konstantu $\mathcal{K}$) ekvivalentan zahtjevu da funkcija $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ mora biti kvadratno integrabilna. Znači, integral u (7.13) uvijek mora biti konačan, tj. manji od ∞, poput (7.21) u jednoj dimenziji. Za integrale po beskonačnom prostoru je to moguće ako podintegralna funkcija **dovoljno brzo trne** u prostoru u svakom času t,

$$|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 \to 0, \qquad |\boldsymbol{r}| \to \infty\,, \tag{7.18}$$

odnosno u jednodimenzionalnom prostoru,

$$|\Psi(x, t)|^2 \to 0, \qquad |x| \to \infty\,. \tag{7.19}$$

Uvjeti (7.18) i (7.19) su očito adekvatni za valne funkcije *vezanih* kvantonâ; primjerice, za Ψ elektrona zarobljenog u vodikovom atomu privlačnim elektrostatskim potencijalom protona. Jasno je da je elektron tada lokaliziran u atomu, pa mu je i amplituda vjerojatnosti nalaženja prostorno ograničena, te mora zadovoljavati rubni uvjet poput (7.18). (Schrödingerovu jednadžbu za valnu funkciju najjednostavnijeg vezanog stanja – naime, kvantona u beskonačno dubokom pravokutnom potencijalu – riješit ćemo u Sekciji 8.6.)

Međutim, u slučajevima kada kvantna čestica *nije vezana*, lako je naći primjer kada njoj pripisana valna funkcija ne zadovoljava uvjet (7.18) odnosno (7.19). Upravo je takav i iznimno važan slučaj najjednostavnijeg nevezanog stanja – naime, slučaj slobodne čestice određenog impulsa (a time i određene energije). Jer, u prethodnom smo poglavlju vidjeli da slobodnu Schrödingerovu jednadžbu najočitije zadovoljavaju monokromatski ravni valovi u obliku "fazora"; tada $\Psi(x, t) = \psi_k(x, t)$ (6.8) u jednoj dimenziji, odnosno $\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}, t)$ (6.21) u tri dimenzije. Te kompleksne eksponencijale nisu trnuće, nego oscilirajuće, jer su kosinusi i sinusi njihovi realni odnosno imaginarni dijelovi: $e^{\mathrm{i}\phi} = \cos\phi + \mathrm{i}\sin\phi$. Zbog $|e^{\mathrm{i}\phi}| = 1$, njihov je modul u svakom času t proporcionalan jedinici, dakle konstantan:

$$|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 \propto |e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - E\,t)}|^2 = 1\,, \quad |\Psi(x, t)|^2 \propto |e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p\,x - E\,t)}|^2 = 1\,. \tag{7.20}$$

Zato monokromatske slobodne čestice očito ne mogu imati konačan integral preko beskonačnog prostora u uvjetu normalizacije (7.13). Isto tako,

u analognom jednodimenzionalnom slučaju nije zadovoljen uvjet kvadratne integrabilnosti

$$||\Psi||^2 \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx < \infty \tag{7.21}$$

za valne funkcije (6.8) monokromatskih slobodnih česticâ.

Ipak, zbog periodičnosti trigonometrijskih funkcija sinus i kosinus, pa prema tome i kompleksnih eksponencijala, možemo vidjeti da ima smisla nešto slabiji uvjet, da postoji konačan integral preko *bilo kojeg konačnog* dijela prostora. Dakle, u jednoj dimenziji, za svaki konačni interval (a, b) mora biti

$$\int_a^b |\Psi(x,t)|^2\, dx < \infty, \qquad \forall\ |b-a| < \infty. \tag{7.22}$$

Naime, kada su funkcije periodične, sve informacije o njima možemo dati pomoću njihovih vrijednosti na nekom *konačnom* intervalu, koji se može ponavljati do u beskonačnost ako treba. Zato (7.22) može poslužiti da se normalizacija za nevezana stanja definira integralom preko tog relevantnog konačnog intervala između a i b. Na primjer, za funkcije $\sin\phi$, $\cos\phi$, te $e^{\pm \mathrm{i}\phi}$, to je interval duljine njihove periodičnosti, to jest 2π, primjerice od $-\pi$ do π – vidi riješeni Zadatak 7.2).

Naravno, za vezana stanja imamo (7.21), a to je kao da se pušta $a \to -\infty$, $b \to +\infty$ u (7.22). Analogno u 3 dimenzije: beskonačni volumen V_∞ koji imamo u (7.13) kao relevantan za vezana stanja, zamjenio bi se nekim konačnim relevantnim volumenom $V_{\text{konačni}}$.

U sljedećoj podsekciji podrazumijeva se da bi integrali bili definirani preko intervalâ odnosno volumenâ koji bi bili relevantni za dati fizikalni slučaj. Zato ispuštamo oznake za njih na integralima u sljedećoj podsekciji.

7.3.3 Norma funkcije je specijalan slučaj skalarnog produkta funkcijâ

U matematici se pokazuje da su funkcije f, g, Ψ, ψ', itd., neka vrsta poopćenih vektorâ, a njihove vrijednosti u pojedinim točkama x ili $\boldsymbol{r}$ (dakle $f(x)$, $g(\boldsymbol{r})$, $\Psi(\boldsymbol{r})$, $\psi'(x)$, itd.) imaju ulogu kontinuiranih komponenti tih funkcijskih vektorâ, po kojima se sumira integriranjem. Zato, u analogiji s normom

običnih vektorâ u 3-dimenzionalnom prostoru (s komponentama $n = 1, 2, 3$),

$$||\boldsymbol{V}||^2 = V^2 = \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{V} = \sum_{n=1}^{3} V_n^2 \,, \tag{7.23}$$

normu funkcije $||\Psi||^2$ nazivamo i (poopćenim, funkcijskim) skalarnim produktom takvog poopćenog, funkcijskog vektora sa samim sobom:

$$||\Psi||^2 \;=\; \int |\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2 \, d^3\boldsymbol{r} \;=\; \int \Psi(\boldsymbol{r},t)^* \, \Psi(\boldsymbol{r},t) \, d^3\boldsymbol{r} \;\equiv\; \langle \Psi | \Psi \rangle \,. \tag{7.24}$$

No kao što postoji i skalarni produkt dva *različita* obična vektora $\boldsymbol{U}$ i $\boldsymbol{V}$,

$$\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{V} = \sum_{n=1}^{3} U_n \, V_n \,, \tag{7.25}$$

postoji i funkcijski skalarni produkt između različitih funkcijâ, $\langle \psi' | \Psi \rangle$, $\langle f | g \rangle$, $\langle \psi | \varphi \rangle$, itd. On je poopćenje produkta (7.25) s 3-dim. vektorâ na funkcije, odnosno poopćenje izraza za normu (7.24) na dvije *različite* funkcije:

$$\langle \psi | \varphi \rangle \;\equiv\; \int \psi(\boldsymbol{r})^* \, \varphi(\boldsymbol{r}) \, d^3\boldsymbol{r} \,, \tag{7.26}$$

odnosno, u jednodimenzionalnom prostoru,

$$\langle \psi | \varphi \rangle \;\equiv\; \int \psi(x)^* \, \varphi(x) \, dx \,. \tag{7.27}$$

Analogija funkcijâ s običnim vektorima nije time ni izdaleka iscrpljena. Na primjer, kao što kažemo da su vektori $\boldsymbol{U}$ i $\boldsymbol{V}$ međusobno okomiti (ortogonalni) ako $\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{V} = 0$, isto tako kažemo da su funkcije ψ i φ međusobno okomite ili ortogonalne ako njihov skalarni produkt iščezava, $\langle \psi | \varphi \rangle = 0$.

Primjerice, pomoću tabličnih integralâ produkata *različitih* sinusnih i kosinusnih funkcijâ $\sin(nx)$, $\sin(kx)$, $\cos(lx)$, i $\cos(mx)$ vidite da dobivate nulu ako integrirate preko njihovog osnovnog intervala periodičnosti duljine 2π. Znači, ako $n \neq k$ i $l \neq m$, svi njihovi skalarni produkti (7.27) su nula. Zato su te funkcije primjeri međusobno okomitih funkcija, što općenito i cjelovito dokazuje riješeni Zadatak 7.2).

U idućim poglavljima, na pr. već u podsekciji 8.6, ima dosta konkretnih, a jednostavnih primjera za ovdje iznesene pojmove.

7.3.4 Opaske o notaciji*

***Čitanje ove podsekcije može se odgoditi do podsekcijâ 8.6.2 i 9.1.1.**

U izrazima za skalarne produkte (7.26) i (7.27) nema ovisnosti o koordinatama, jer je preko njih prointegrirano. Međutim, ponekad će biti korisno pisati u $\langle ...|... \rangle$ tu ovisnost funkcijâ, ali ne da bi se (pogrešno) naznačilo da postoji ta ovisnost skalarnog produkta, nego baš da se ukaže da se u njemu **prointegriralo preko simbolâ koji se ponavljaju** (slično Einsteinovoj konvenciji da se sumira preko ponovljenih indeksâ iako se suma ne piše eksplicite). I obratno, ne integrira se preko simbolâ koji se *ne* ponavljaju, pa ostaje ovisnost o njima.

Najjasniju potrebu za tim ilustriraju skalarni produkti ravnih valova; to jest, kompleksnih eksponencijalâ $\exp(\mathrm{i}kx)$. Tu ovisnosti o koordinati x i o valnom broju k ulaze simetrično, ravnopravno. Zbog primjenâ (pogotovo onih gdje će k ispasti diskretan, $k \to k_n$) zgodnija je konvencija da na toj funkciji koordinatu (x) označavamo kao varijablu, a valni broj (k) kao parametar: $\exp(\mathrm{i}kx) \equiv \mathtt{f}_k(x)$. Ali ako je k kontinuirana varijabla kao i koordinata x, onda skalarni produkt dvije takve funkcije možemo načiniti u skladu s definicijom (7.27) bilo integrirajući po koordinati x, bilo integrirajući po valnom broju k (preko intervala koje ne trebamo specificirati u trenutnom kvalitativnom razmatranju). U fizikalnim primjenama te dvije stvari naravno nisu iste. Koju od njih radimo, pokazuje nam notacija gdje je ponovljeni simbol onaj po kome se integrira, pa ovisnost o njemu nestaje, a ostaje ovisnost o ostalom. Znači, ponovljeni x u $\langle ...|... \rangle$ znači da se po njemu integrira, a **ne** znači ovisnost o x sljedećeg skalarnog produkta:

$$\langle e^{\mathrm{i}\,k\,x} | e^{\mathrm{i}\,k'x} \rangle = \langle \mathtt{f}_k(x) | \mathtt{f}_{k'}(x) \rangle \;\equiv\; \int dx\, (e^{\mathrm{i}\,k\,x})^*\, e^{\mathrm{i}\,k'x} \;=\; \int dx\, e^{\mathrm{i}\,(k'-k)\,x}$$
$$= \text{funkcija od } (k'-k)\,. \qquad (7.28)$$

Analogno tome, u donjem skalarnom produktu ponovljeni k u $\langle ...|... \rangle$ znači da se tu integrira po k, a rezultat ovisi o x i x':

$$\langle e^{\mathrm{i}\,k\,x} | e^{\mathrm{i}\,kx'} \rangle = \langle \mathtt{f}_k(x) | \mathtt{f}_k(x') \rangle \;\equiv\; \int dk\, (e^{\mathrm{i}\,k\,x})^*\, e^{\mathrm{i}\,kx'} \;=\; \int dk\, e^{\mathrm{i}\,(x'-x)\,k}$$
$$= \text{funkcija od } (x'-x)\,. \qquad (7.29)$$

No, i kod manje simetričnih odnosâ između x i k, na pr. kada je k diskretan

($k \to k_n \propto n \in \mathbb{N}$), takva notacija (gdje dvostruko pisanje x-ovisnosti znači da baš ona integracijom otpada) propisuje formiranje skalarnog produkta precizno, osim intervala integracije. Na primjer, skalarni produkt realne funkcije $\sin(k_n x)$ i neke općenite funkcije $f(x)$ je:

$$\langle \sin(k_n x) | f(x) \rangle = \int \sin(k_n x)\, f(x)\, dx \;=\; \text{rezultat ovisan o } k_n \text{ odnosno } n\,, \tag{7.30}$$

vidi na primjer izraze (9.8), (9.7) i (9.6).

Naravno, na rezultat utječe i kako zadamo granice integracije. Na primjer, interval od $-\infty$ do $+\infty$ u (7.28) i (7.29) daje $2\pi\times$Diracove delta-funkcije $\delta(k'-k)$ odnosno $\delta(x'-x)$, vidi (9.31)-(9.33), gdje je k kontinuirana varijabla kao i x. Ako je pak u (7.28) integracija od donje do gornje granice samo preko intervala konačne *duljine periodičnosti* Λ, rezultat (7.28) je ta konačna duljina integracije Λ puta Kroneckerov simbol $\delta_{kk'}$ (7.35), gdje su k i k' diskretni, $k = n\,2\pi/\Lambda$ i $k' = n'\,2\pi/\Lambda$, jer $n, n' \in \mathbb{N}$. To ćemo detaljno pokazati za dva poglavlja, kod formule (9.19).

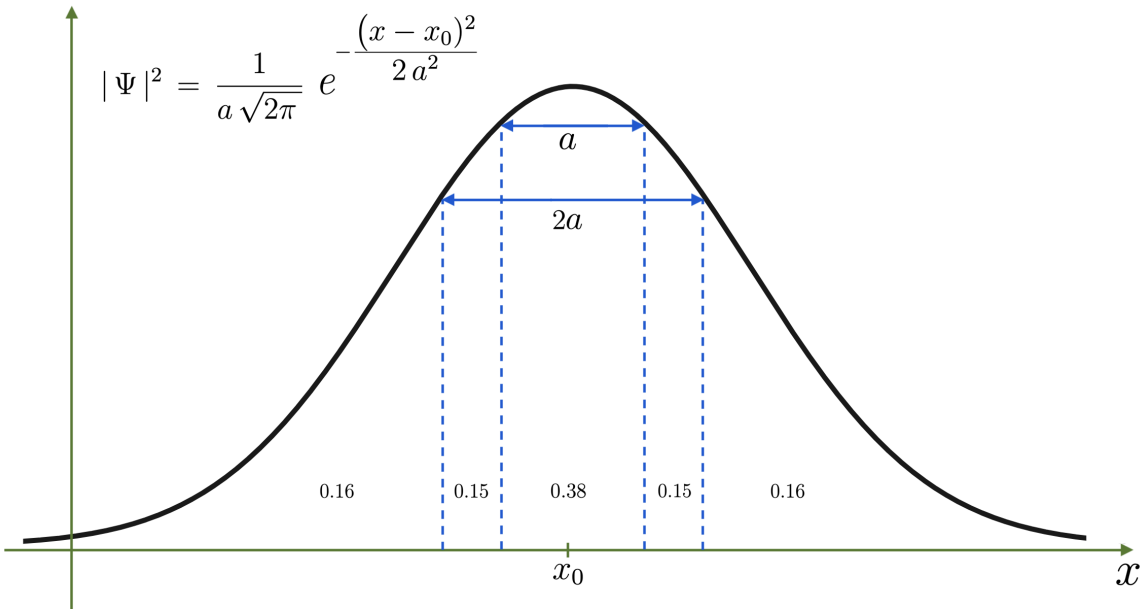
U svakom slučaju, notacija $\langle \psi | \varphi \rangle$ se u fizičarskom žargonu često izgovara "bra ψ ket φ", zbog engleske riječi za zagradu $\langle ... | ... \rangle$ – "bracket". Zapamtimo da se funkcija u prvom, "bra" dijelu kompleksno konjugira u podintegralnoj funkciji. To se ne mora činiti kod skalarnog produkta običnih vektora jer su oni realni. Ali funkcije mogu biti kompleksne, pa bez kompleksne konjugacije norma funkcije (7.24) ne bi imala pozitivno definitan integrand, a norma to mora imati. Međutim, norma funkcije je specijalan slučaj ($\psi = \varphi$) skalarnog produkta funkcijâ (7.26), pa je i u njemu kompleksna konjugacija nužna.

Za kraj, napomenimo da je u najraširenijoj matematičarskoj notaciji za skalarni produkt funkcijâ, (ψ, φ), redosljed kompleksnog konjugiranja funkcijâ suprotan fizičarskoj konvenciji u (7.26)-(7.27), pa tada $(\psi, \varphi) = \langle \psi | \varphi \rangle^*$.

7.4 Zadaci 7

7.1) a) Nađite konstantu normalizacije $\mathcal{N}$ valne funkcije

$$\Psi(x,t) \;=\; \mathcal{N}\, e^{\mathrm{i}(k\,x\,-\,\omega\,t)}\; e^{-\frac{(x\,-\,x_0)^2}{4\,a^2}}\,. \tag{7.31}$$



Slika 7.5: Apsolutni kvadrat valne funkcije (7.31) je Gaussova normalna raspodjela standardne devijacije a. (Duljine na slici su samo instruktivne, a ne precizne).

b) Što možemo reći o veličini amplituda vjerojatnosti, te gustoće vjerojatnosti, za nalaženje kvantne čestice u stanju (7.31) ?

c) Kolika je vjerojatnost da se čestica nađe na položajima $x > x_0 + a$?

Pomoć za sve tri točke: uočite vezu valne funkcije (7.31) s Gaussovom normalnom raspodjelom! **Rješenje** potom daje Slika 7.5.

d) Nađite prosječnu (očekivanu) vrijednost koordinate x, kako izračunom $\langle x \rangle$ kroz (7.16) s konkretnom funkcijom (7.31), tako i općenitije – pozivanjem na simetriju.

7.2) Dokažite da su različiti sinusi i kosinusi međusobno ortogonalni, a da kvadrati svih sinusâ i kosinusâ imaju integral jednak π preko svakog intervala

duljine 2π. To jest, dokažite relacije ortogonalnosti (7.32), (7.33) i (7.34):

$$\int_d^{d+2\pi} \sin(n\phi)\,\cos(m\phi)\,d\phi \;=\; 0 \tag{7.32}$$

$$\int_d^{d+2\pi} \sin(n\phi)\,\sin(m\phi)\,d\phi \;=\; \pi\,\delta_{nm}\,(1-\delta_{n0}) \tag{7.33}$$

$$\int_d^{d+2\pi} \cos(n\phi)\,\cos(m\phi)\,d\phi \;=\; \pi\,\delta_{nm}\,(1+\delta_{n0})\,, \tag{7.34}$$

gdje su n i m cijeli brojevi, a δ_{nm} označava Kroneckerov simbol,

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & \text{ako } n = m \\ 0 & \text{ako } n \neq m \end{cases} . \tag{7.35}$$

Rješenje: Za osobit slučaj $n = 0 = m$, kada je sinus jednak 0, a kosinus 1, dokaz svake od tri relacije lako načinimo posebno. Za ostale slučajeve, $n \neq 0$ ili/i $m \neq 0$, primijenimo poznate trigonometrijske formule koje povezuju sinuse ili pak kosinuse zbroja i razlike kuteva s njihovim produktima.

Na primjer, za dokaz (7.32) koristimo

$$\sin(\alpha\pm\beta) = \sin\alpha\,\cos\beta \,\pm\, \cos\alpha\,\sin\beta\,,$$

jer otud dobivamo

$$2\,\sin\alpha\,\cos\beta = \sin(\alpha+\beta) + \sin(\alpha-\beta)\,.$$

Time integral (7.32) postaje

$$\int_d^{d+2\pi} \sin(n\phi)\,\cos(m\phi)\,d\phi = \frac{1}{2}\int_d^{d+2\pi} [\,\sin(n+m)\phi + \sin(n-m)\phi\,]\,d\phi$$

$$= \frac{1}{2}\left[-\frac{\cos(n+m)\phi}{(n+m)} \,-\, \frac{\cos(n-m)\phi}{(n-m)} \right]_{\phi=d}^{\phi=d+2\pi} \;=\; 0\,.$$

U svakom slučaju tu dobivamo 0, jer su oba člana naravno periodična s 2π. (Naravno, ako $n = m$, u integrandu je drugi pribrojnik 0, pa tada postoji samo prvi član u zadnjem redu.)

Isto tako $\cos(\alpha \mp \beta) = \cos\alpha\,\cos\beta \pm \sin\alpha\,\sin\beta$ daje

$$2\,\sin\alpha\,\sin\beta = \cos(\alpha-\beta) - \cos(\alpha+\beta)\,,$$

pa je integral (7.33)

$$\int_d^{d+2\pi} \sin(n\phi)\,\sin(m\phi)\,d\phi = \frac{1}{2}\int_d^{d+2\pi} [\,\cos(n-m)\phi - \cos(n+m)\phi\,]\,.$$

Analogno prethodnom slučaju, kada $n \neq m$, dobivamo nulu zbog periodičnosti sinusâ koje dobivamo integracijom kosinusâ u gornjem integralu. Isto se dogodi s drugim članom u integrandu i onda, kada $n = m$. Tada međutim prvi član u integrandu postaje $\cos(n-m)\phi = \cos 0 = 1$, pa integral (7.33) daje $\frac{1}{2}\,1\,[(d+2\pi) - d\,] = \pi$.

Relaciju (7.34) očito možemo dokazati analogno, koristeći

$$2\,\cos\alpha\,\cos\beta = \cos(\alpha-\beta) + \cos(\alpha+\beta)\,.$$

Ako u relacijama (7.32), (7.33) i (7.34) odaberemo $d = -\pi$, imat ćemo interval integracije simetričan oko ishodišta.

7.3) Nađite konstantu normiranja $\mathscr{N}$ valne funkcije

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \mathscr{N}\,\sin\left(n\,\frac{\pi}{L}\,x\right) & 0 < x < L \\ 0 & x < 0 \;\text{ ili }\; x > L \end{cases}\,, \tag{7.36}$$

gdje je n prirodni broj. (Za primjenu, vidi podsekciju 8.6.) Što možete reći o intervalu periodičnosti ovako zadate sinusne funkcije?

7.4) Pretpostavimo da pokus interferencije dva proreza radimo s izvorom tako niskog intenziteta da kvantne čestice (na primjer elektroni) kroz proreze stižu jedan po jedan; to jest, dovoljno rijetko da uspijevamo pratiti pojedinačne detekcije na zaslonu, pa interferentni uzorak dobivamo akumulacijom podataka tokom vremena. Dakle, kao na Slici 7.4. Međutim, pretpostavimo još i to, da smo taj pokus načinili tako da možemo ustanoviti koji je elektron prošao kroz koji prorez; to jest, da znamo iz kojeg je proreza čestica stigla kad ju detektiramo u točki x. To se može načiniti primjerice tako da obasjavamo proreze fotonima pa se oni raspršuju na elektronima koji kroz njih

prolaze jedan po jedan, a mi to pratimo na drugom detektoru, fotonskom, evidentiramo i povezujemo s odgovarajućim detekcijama elektronâ.

Zadatak je da objasnite što će se u tom slučaju dogoditi s interferentnim uzorkom (7.10).

Rješenje: Detaljna rasprava data je već u Feynmanovim predavanjma I [19] o općoj sveučilišnoj fizici, u poglavljima 37 i 38, a ponovljena je i u Poglavlju 1. Feynmanovih predavanja III [35], koja su posvećena kvantnoj mehanici. Ovdje sažeto recimo ovo: ako u svakoj točki x detektora elektronâ možemo reći koji elektron je došao kroz prorez 1, a koji kroz prorez 2, onda običnim zbrajanjem nužno mora biti

$$G(x) = G_1(x) + G_2(x)\,. \tag{7.37}$$

Dakle, interferencija tada mora nestati. I zaista, ako se u pokusu interferencije dva proreza uključi opisani mehanizam određivanja koji je elektron prošao kroz koji prorez, interferentni član $G^{\rm inter}_{\rm fer}(x)$ u (7.10) biva zbrisan, pa ostaje samo (7.37), isto kao na Slici 7.2 za klasične čestice kojima možemo pratiti putanju.

Heisenbergove relacije neodređenosti (6.38)-(6.39) objašnjavaju kako se to događa, te tako štite kvantnu fiziku od proturječnosti.

Naime, foton koji može razlučiti da je položaj elektrona kod jednog proreza a ne kod drugog, vrlo bliskog, mora imati dovoljno kratku valnu duljinu λ_γ. No onda mu je impuls $p_\gamma = h/\lambda_\gamma$ dovoljno velik da elektronu poveća neodređenost impulsa Δp_x toliko da de Broglieva valna duljina elektrona također postane tako neodređena (nemonokromatska, tj. razmazanih vrijednosti preko $\Delta\lambda$) da se interferentni uzorak zbriše. Još zorniji način da se opiše isto, tj. brisanje interferentne slike, je to da je povećanje neodređenosti impulsa Δp_x dovoljno veliko da se se elektroni mogu skrenuti iz interferentnih maksimuma u interferentne minimume. Uvjet da se to **ne** dogodi iako fotoni mogu razlučiti kroz koji je prorez elektron prošao, je da istovremeno i Δp_x bude odgovarajuće ograničen, i da Δx bude znatno manja od polovice razmaka između prorezâ. Zajedno, to dovodi do uvjeta $\Delta x\,\Delta p_x \ll h/4$. On je očito proturiječan Heisenbergovoj relaciji neodređenosti (6.38), pa ga je *nemoguće* zadovoljiti. Detaljan izvod tog uvjeta je dat u *Liboffovoj* sekciji 2.9 [18], i on predstavlja dokaz da interferentni član i interferentna slika moraju nestati ako odredimo iz kojeg proreza dolazi koji elektron.

Kvalitativno tu nemogućnost shvaćamo ovako: ako pokušamo izbjeći remećenje interferentne slike tako da smanjimo p_γ, tj. povećamo fotonsku valnu duljinu λ_γ toliko da se interferentni uzorak ponovo pojavi ($G_{\text{fer}}^{\text{inter}}(x) \neq 0$), razlučivanje više neće biti dovoljno da odredimo iz kojeg proreza dolazi elektron.

Naravno, ako potpuno "ugasimo" fotone, tj. ako prestanemo pokušavati odrediti gdje je elektron prošao, interferentni se uzorak potpuno vrati na staro, kao na Slikama 7.3 i 7.4.

Poglavlje 8

Najjednostavniji kvantni valovi i njihove jednadžbe

U prethodnom smo poglavlju zaključili da de Broglieve valove u kvantnoj fizici treba interpretirati kao **valove vjerojatnosti**.

Oni su dati *valnom funkcijom* položaja i vremena, $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$, koja predstavlja tzv. **amplitudu vjerojatnosti**, pri čemu "intenzitet vala",

$$|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 \,=\, \Psi(\boldsymbol{r}, t)^* \, \Psi(\boldsymbol{r}, t) \,\equiv\, G(\boldsymbol{r}, t)\,, \tag{8.1}$$

u kvantnoj mehanici predstavlja **gustoću vjerojatnosti** nalaženja, u točki $\boldsymbol{r}$ i u čas t, kvantne čestice ("kvantona") čije stanje opisuje valna funkcija $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$.

U ovom ćemo poglavlju na najjednostavnijim primjerima razvijati teorijski formalizam jednadžbi za kvantne valove vjerojatnosti.

8.1 Osnovno valno rješenje – ravni val

U svakom fizikalnom kontekstu, najjednostavniji vremenski ovisan val je takozvani "putujući ravni val" - dobro poznato monokromatsko rješenje klasične valne jednadžbe (2.10). Matematički ga opisuje neka od funkcijâ koje zadovoljavaju jednadžbu harmoničkog oscilatora (2.9): kompleksna eksponencijala

(8.3), te njen realni ($\mathfrak{Re}$) i imaginarni ($\mathfrak{Im}$) dio iz Eulerove formule (8.2) – dakle, kosinus odnosno sinus istog argumenta θ:

$$e^{\mathrm{i}\,\theta} = \cos\theta + \mathrm{i}\,\sin\theta \;\; = \text{putujući val } \textbf{ako } \; \theta = \phi_k(x,t) \;\equiv\; k\,x - \omega\,t\,. \qquad (8.2)$$

(Tu naznačujemo ovisnost o k, dok ovisnost o ω ispuštamo, jer $\omega = \omega(k)$.) Ta karakteristična prostorno-vremenska kombinacija u fazi $\phi_k(x,t)$ je argument svim spomenutim *putujućim* harmoničkim funkcijama [vidi tekst oko (8.5)]. Konkretno, u slučaju kompleksne eksponencijale (kojoj konstantnu amplitudu A možemo odabrati realnom bez gubitka općenitosti),

$$\psi_k(x,t) \;=\; A\,e^{\mathrm{i}\,\phi_k(x,t)} \;=\; A\,e^{\mathrm{i}\,(\,k\,x\,-\,\omega\,t\,)} \;=\; A\,e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,p\,x\,-\,\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,E\,t}\,. \qquad (8.3)$$

Iza *zadnjeg* znaka jednakosti uvrstili smo relacije (7.1): Planckovu $E = \hbar\omega$, te Einstein–de Broglievu $p = \hbar k = h/\lambda$, koje vrijede za slučaj kvantnih objekata (dok bi funkcije ispred toga mogle opisivati i klasične valove).

I za kvantne i za sve vrste klasičnih valova treba primijetiti ovu prednost kompleksne eksponencijale za lakše računanje: prostorna i vremenska ovisnost u njenom argumentu $\phi_k(x,t)$ mogu se faktorizirati,

$$\psi_k(x,t) \;=\; A\,e^{\mathrm{i}\,k\,x}\,e^{-\mathrm{i}\,\omega\,t} \;\equiv\; \varphi_k(x)\,\mathcal{T}_\omega(t)\,. \qquad (8.4)$$

Dakle, u kompleksnim eksponencijalama (8.3) odnosno (8.4), prostornu ovisnost daje $\varphi_k(x) = A\,e^{\mathrm{i}\,k\,x}$, dok $\mathcal{T}_\omega(t) = e^{-\mathrm{i}\,\omega\,t}$ predstavlja vremensku oscilaciju u svakoj odabranoj točki x. Kasnije ćemo vidjeti da za kvantne valne funkcije važnost tog pitanja – može li se vremenska ovisnost tako odfaktorizirati, daleko nadilazi važnost lakšeg računanja. (Vidjet ćemo da to odlučuje postoje li stacionarna stanja, čiju je važnost uvidio već N. Bohr.)

Niti $\mathfrak{Re}\psi_k(x,t) = A\cos(\,k\,x\,-\,\omega\,t\,)$ niti $\mathfrak{Im}\psi_k(x,t) = A\sin(\,k\,x\,-\,\omega\,t\,)$ ne možemo tako faktorizirati. No i te funkcije, kao i kompleksna eksponencijala $\psi_k(x,t)$, predstavljaju valove koji, dok putuju duž jedne kartezijanske koordinatne osi (x), osciliraju harmonički: u vremenu, periodom τ odnosno frekvencijom $\omega = 2\pi\nu = 2\pi/\tau$; u prostoru oni pak osciliraju valnom duljinom λ odnosno valnim brojem k, modula $|k| = 2\pi/\lambda$. Pozitivan valni broj znači da ravni val putuje u smjeru $x \to +\infty$, dok negativan valni broj, $k = -|k|$, znači da val putuje u smjeru $x \to -\infty$, u oba slučaja brzinom iznosa $v(k) = \omega(k)/|k|$. Sve je to zato što karakteristični argument (8.2)

putujućeg ravnog vala možemo pisati

$$\phi_k(x,t) \,=\, k\,(\,x - \frac{\omega(k)}{k}\,t\,) \,=\, \pm|k|\,(\,x \mp v(k)\,t\,) \,\equiv\, \pm|k|\,\zeta_{\pm v}(x,t)\,, \qquad (8.5)$$

pa nakon povećanja vremena t za Δt, argument $\phi_k(x,t) = k\,\zeta_{\pm v}(x,t)$ ima istu vrijednost na koordinati x koja je promijenjena za $\Delta x = \pm\, v\,\Delta t$.

Svi su ti valovi čisto monokromatski jer u prostoru osciliraju samo jednim valnim brojem k, odnosno samo jednom valnom duljinom $\lambda = 2\pi/|k|$, dok u vremenu osciliraju samo jednom frekvencijom $\omega = \omega(k) = 2\pi\nu(\lambda)$, koja odgovara tom valnom broju k odnosno valnoj duljini λ.

(Općenitije, ne-monokromatske valove tretirat ćemo u Poglavlju 9.)

8.2 Najjednostavnije svojstvene diferencijalne jednadžbe

Ako su monokromatski ravni valovi (8.3) kvantni, onda im zbog Planck–Einstein–de Broglievih relacija (7.1), odgovara samo jedna, točno određena energija E i samo jedan, točno određen linearni impuls p kvantnog objekta. Takvi valovi dakle odgovaraju stanjima kvantona s određenim E i p.

Do na faktore $\pm\,\mathrm{i}\hbar$, **djelovanje** ("operiranje") **parcijalnih derivacija po prostoru i po vremenu** na kompleksne eksponencijale ψ_k (8.3) rezultira samo množenjem tih funkcija njihovim valnim brojevima k (tj., impulsima $p = \hbar k \in [-\infty, +\infty]$) odnosno njihovim frekvencijama ω (tj., energijama $E = \hbar\omega \in [0, +\infty]$), tako da

$$-\,\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}\,\psi_k(x,t) \,\equiv\, \hat{p}\,\psi_k(x,t) \,=\, \hbar\,k\,\psi_k(x,t) \,=\, p\,\psi_k(x,t)\;, \qquad (8.6)$$

$$\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi_k(x,t) \,\equiv\, \hat{E}\,\psi_k(x,t) \,=\, \hbar\,\omega\,\psi_k(x,t) \,=\, E\,\psi_k(x,t)\;, \qquad (8.7)$$

ali bez ikakve promjene tih funkcija. Zato funkcije $\psi_k(x,t) = \varphi_k(x)\mathcal{T}_\omega(t)$ (8.3) nazivamo **svojstvenim funkcijama** prostornih i vremenskih parcijalnih derivacija. Zahvaljujući svom produktnom obliku, $\psi_k(x,t)$ je simultana

svojstvena funkcija obje te derivacije. Naravno, zasebno je faktor $\varphi_k(x)$ svojstvena funkcija samo x-derivacije, a faktor $\mathcal{T}_\omega(t)$ svojstvena funkcija samo t-derivacije.

Te pak derivacije, nakon množenja odgovarajućim faktorima $\pm \mathrm{i}\hbar$, nazivamo (derivativnim ili diferencijalnim) **operatorom $\hat{p}$ linearnog impulsa** i **operatorom $\hat{E}$ energije.** (Mi ćemo sve operatore označavati simbolom $\hat{}$ nad odgovarajućom oznakom.) Objekti njihovog djelovanja ("operiranja", tu konkretno deriviranja) su sve funkcije prostornih i vremenskih varijabli, x i t. Ako su te funkcije upravo ravni valovi ψ_k (8.3), tj. svojstvene funkcije tih operatora (zvane i **svojstvena stanja** energije i impulsa), djelovanje $\hat{p}$ i $\hat{E}$ daje točno određene vrijednosti p i E, brojeve koje nazivamo **svojstvenim vrijednostima** impulsa odnosno energije. Ako je kvantna čestica u stanju opisanom svojstvenom funkcijom ψ_k (8.3), rezultat (idealnog) mjerenja njenog impulsa ili energije može biti samo svojstvena vrijednost p odnosno E, jer *nikakvih drugih* vrijednosti impulsa ili energije *nema* u svojstvenoj funkciji ψ_k (8.3).

Jednadžbe (8.6) i (8.7) nazivamo **svojstvenim jednadžbama** impulsa odnosno energije. Svi ti debelo otisnuti nazivi ispod (8.7) nastali su po uzoru na poznatije, ali matematički usko povezane **svojstvene vektore** iz linearne algebre, te njihove svojstvene vrijednosti i matrične svojstvene jednadžbe. Međutim, "operiranje" tada nije deriviranje nego množenje matricama, a objekti-vektori na kojima one "operiraju"/djeluju su matrice-stupci i matrice-redci. No matematička struktura oba područja je tako bliska da pojašnjava tvrdnju u podsekciji 7.3.3 da matematika pokazuje da su funkcije jedna vrsta vektorâ. Zato su i svojstvene funkcije - svojstveni vektori.

Za razliku od kompleksnih eksponencijala $\psi_k(x,t)$, odgovarajući kosinusni i sinusni valovi [tj. $\mathfrak{Re}$ i $\mathfrak{Im}$ dio od (8.3)], iako su i oni monokromatski, **nisu** svojstvene funkcije gore navedenih operatora. Naime, mijenjaju se pod njihovim djelovanjem. [Deriviranje mijenja funkciju cos u $-\sin$, a sin u cos, te oni očito ne zadovoljavaju svojstvene jednadžbe (8.6) i (8.7)].

8.3 Operator Hamiltonijana

Uočimo da pomoću najjednostavnijeg derivativnog operatora $\hat{p}$ (8.6), slobodnu vremenski ovisnu Schrödingerovu jednadžbu (6.11) možemo napisati

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\Psi(x,t) = \frac{\hat{p}^{\,2}}{2m}\,\Psi(x,t) \;\equiv \hat{H}_0\,\Psi(x,t) \quad \left(\text{jer } -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\hat{p}^{\,2}}{2m}\right), \quad (8.8)$$

pri čemu $\hat{H}_0$ nazivamo *operatorom* slobodnog *Hamiltonijana.*

Objasnimo te novosti u terminologiji i notaciji. Prisjetimo se da smo u prethodnom poglavlju, u Sekciji 6.2, uveli Hamiltonovu funkciju ili *Hamiltonijan* (oznaka H), što u klasičnoj analitičkoj mehanici označava energiju izraženu kao funkciju impulsâ umjesto brzinâ; na primjer, $E(x,\dot{x}) = H(x,p)$. (Za razliku od relacija (8.6)-(8.8), tu nema oznake $\hat{}$, jer ovaj odlomak govori o *klasičnim* funkcijama energije odnosno Hamiltonijana.)

Energiju slobodne masivne nerelativističke čestice je pogodno izražavati na razne načine; nekada pomoću brzine v, a sada pomoću impulsa p:

$$E(v) \;=\; \frac{m\,v^2}{2} \;=\; T(v) \;=\; T(p) \;=\; E(p) \;=\; \frac{p^2}{2\,m} \;\equiv\; H_0(p)\,. \quad (8.9)$$

Supskript $_0$ i tu znači da se radi o *slobodnom* Hamiltonijanu, tj. da je sva energija kinetička, $E = T$. Ako pak potencijalna energija čestice (koja obično ovisi o koordinati) ne iščezava, $V \neq 0$, pa

$$E \;=\; T + V\,, \quad \text{te} \quad H \;=\; H_0 + V \;=\; \frac{p^2}{2m} + V\,. \quad (8.10)$$

U prethodnoj smo sekciji preko svojstvene jednadžbe (8.7) uvidjeli da je energiji E pridružen diferencijalni operator proporcionalan parcijalnoj derivaciji po vremenu,

$$E \to \hat{E} \;\equiv\; i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial t} \;=\; -\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial t}\,. \quad (8.11)$$

Isto smo tako, zbog svojstvene jednadžbe (8.6), uvidjeli da je impulsu p pridružen diferencijalni operator $\hat{p}$ koji je, do na faktor $-i\,\hbar$, dat parcijalnom derivacijom po Kartezijevoj koordinati,

$$p \to \hat{p} \;\equiv\; -i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial x} \;=\; \frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial x}\,. \quad (8.12)$$

Ako naznačenu zamjenu (8.12) izvršimo u klasičnom Hamiltonijanu H, od njega će nastati operator $\hat{H}$, dakle *još jedan* (uz (8.11)) diferencijalni operator energije, i to drugog reda u derivaciji po koordinati x.

Najjednostavniji slučaj je naravno slobodna čestica i njezina čisto kinetička energija $E = T$ odnosno slobodni Hamiltonijan H_0 (8.9). Zamjena (8.12) njima pridružuje *operator* slobodnog Hamiltonijana $\hat{H}_0$ odnosno operator kinetičke energije $\hat{T}$,

$$\hat{T} \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \equiv \hat{H}_0 \,. \tag{8.13}$$

Tom identifikacijom, na primjer, (6.11) prelazi u hamiltonijanski oblik (8.8).

Primijetimo da su svi operatori derivacijâ u formulama (8.11)-(8.13) napisani samo formalno, simbolično, jer derivacije moraju djelovati na nešto. Dakle, diferencijalni operatori dobro definirano značenje nemaju kad stoje sami, nego kad djeluju na neku funkciju, npr. valnu funkciju $\Psi(x,t)$ u (8.8).

Zato možemo reći da *E-p* relacija (6.10) ili (8.9) (a u tri dimenzije (6.20)) za slobodnu nerelativističku česticu preko operatorskih zamjena (8.11) i (8.12) reproducira slobodnu Schrödingerovu jednadžbu (6.11) odnosno (8.8).

Ako je valna funkcija upravo ona osnovna, to jest monokromatski ravni val (8.3), $\Psi(x,t) = \psi_k(x,t)$, djelovanje operatora $\hat{H}_0$ s desne strane (8.8) daje energiju u obliku (slobodne) Hamiltonove funkcije $H_0 = p^2/2m$,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_k(x,t) = E\,\psi_k(x,t) = \frac{p^2}{2m}\psi_k(x,t) = H_0\,\psi_k(x,t)\,, \quad \forall\, k. \tag{8.14}$$

Očito su ravni valovi (8.3) svojstvene funkcije i trećeg operatora, slobodnog Hamiltonijana $\hat{H}_0$, sa svojstvenom vrijednosti $E = H_0 = p^2/2m = \hbar^2k^2/2m$ (8.9), isto kao što su svojstvene funkcije operatorâ impulsa (8.12) i energije (8.11), sa svojstvenim vrijednostima p odnosno E.

Štoviše, razmatranja u podsekciji 6.2.1 prethodnog poglavlja ovdje impliciraju da su ravni valovi (8.3) svojstvene funkcije i operatora Hamiltonijana s **konstantnim** članom potencijalne energije $V = konstanta$. Naravno, svojstvena vrijednost energije tada je $E = \hbar^2k^2/2m + konstanta$ (6.16).

Međutim, valna funkcija $\Psi(x,t)$ koja je superpozicija ravnih valova, (6.13) ili općenito (6.14) (tzv. "valni paket"), nije svojstvena funkcija operatora

Hamiltonijana $\hat{H}_0$, ali rješava slobodnu Schrödingerovu jednadžbu, pa i onu s *konstantnim* potencijalom, jer ju zadovoljava svaki od ravnih valova koji čine superpoziciju, vidi podsekciju 6.2.1.

Očito su znatno složenije situacije gdje potencijalna energija čestice *nije* konstanta, pa na nju djeluje sila $F(x,t) = -\partial V(x,t)/\partial x$. Ukupna energija je tada

$$E = T(p) + V(x,t) = \frac{p^2}{2m} + V(x,t) \equiv H(p,x,t)\,. \tag{8.15}$$

Zamjene operatorima poput relacije (8.12) ukazuje da u kvantnoj mehanici Hamiltonijan postaje operator

$$H \to \hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x},t)\,, \tag{8.16}$$

gdje smo uvažili da i položajna koordinata x može biti zamijenjena odgovarajućim operatorom $\hat{x}$, pa i funkcije koordinata (poput potencijalne energije V) postaju operatori. Međutim, ako operatori djeluju na funkcije koordinata, operator položajne koordinate $\hat{x}$ je naprosto *sama ta koordinata*. Dakle, ona djeluje običnim množenjem – kao množiteljski, *multiplikativni* operator:

$$\hat{x}\,\Psi(x,t) = x\,\Psi(x,t)\,. \tag{8.17}$$

Taylorov razvoj operatorskih funkcija kao što je $\hat{V}(\hat{x},t)$ onda pokazuje da isto mora vrijediti i za funkcije operatorâ položajnih koordinatâ. Na primjer,

$$\hat{V}(\hat{x},t)\,\Psi(x,t) = V(x,t)\,\Psi(x,t)\,. \tag{8.18}$$

Prema tome, odgovarajuća Schrödingerova jednadžba je

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\Psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right]\Psi(x,t)\,. \tag{8.19}$$

To je i jedini način kako smo operatoru kinetičke energije mogli dodati operator potencijalne energije, a da Schrödingerova jednadžba ostane linearna u $\Psi(x,t)$.

Hamiltonijan sadržava i kinetičku i potencijalnu energiju, pa prethodnu vremenski ovisnu Schrödingerovu jednadžbu (**vOSj**) zapisujemo kompaktno:

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\Psi(x,t) = \hat{H}\,\Psi(x,t)\,. \tag{8.20}$$

Primijetimo da u **vOSj** s jedne strane na $\Psi(x,t)$ djeluje operator energije dât parcijalnom derivacijom po vremenu t, a s druge strane $\hat{H}$, dakle operator energije (8.16) koji od derivacija sadrži samo one po koordinati, ali ne i po t.

Svaka funkcija Ψ koja rješava Schrödingerovu jednadžbu predstavlja moguće stanje sistema s datim Hamiltonijanom. Zato valnu funkciju Ψ nazivamo i *funkcija stanja*, a $\Psi(x,t)$ je, precizno govoreći, njena vrijednost u točki x u čas t.

8.4 Schrödingerova jednadžba u tri dimenzije

Poopćenje dosad izloženog na tri dimenzije vrlo je lagano. Uostalom, već smo u podsekciji 6.2.2 pred-prethodnog poglavlja učinili skoro sve potrebno. Preostalo je samo uočiti da se operatorska zamjena (8.12) poopćava na vektorsku verziju

$$\boldsymbol{p} \to \hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\,\boldsymbol{\nabla} = -i\hbar\,(\boldsymbol{e}_x\,\frac{\partial}{\partial x} + \boldsymbol{e}_y\,\frac{\partial}{\partial y} + \boldsymbol{e}_z\,\frac{\partial}{\partial z})\,, \qquad \hat{\boldsymbol{r}} \to \boldsymbol{r}\,, \tag{8.21}$$

što implicira i

$$H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) \to \hat{H}(\hat{\boldsymbol{r}},\hat{\boldsymbol{p}}) = \hat{H}(\boldsymbol{r}, -i\hbar\boldsymbol{\nabla}) = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\nabla^2 + V(\boldsymbol{r},t)\,. \tag{8.22}$$

To je sve konzistentno s tim da smo već u prethodnom poglavlju našli da u trodimenzionalnom prostoru općenita **vOSj** (6.24) glasi

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 + V(\boldsymbol{r},t)\right]\Psi(\boldsymbol{r},t)\,r\,. \tag{8.23}$$

Kako relacija (8.22) daje $\hat{H}$, i u tri dimenzije **vOSj** u kompaktnom hamiltonijanskom zapisu glasi

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\Psi(\boldsymbol{r},t) = \hat{H}\,\Psi(\boldsymbol{r},t)\,. \tag{8.24}$$

Ona određuje vremenski razvoj kvantnomehaničke valne funkcije $\Psi(\boldsymbol{r},t)$, odnosno kvantnog stanja koje ona opisuje. To je inače jedan od *postulata* kvantne mehanike kad ju formuliramo na aksiomatski način.

8.5 Vremenski neovisna Schrödingerova jednadžba i stacionarna stanja

Ako je Hamiltonijan **neovisan o vremenu**, tj. ako je zadovoljeno $V(\boldsymbol{r},t) = V(\boldsymbol{r})$ za inače potpuno proizvoljan potencijal V, možemo naći rješenje Schrödingerove jednadžbe (8.24) koje odgovara kvantnom stanju čija energija je točno određena i konstantna u vremenu – dakle, rješenje koje je svojstveno stanje energije.

8.5.1 Specijalni slučaj ravnih valova

Za uvodnu ilustraciju primijetimo da smo neka od takvih rješenja već našli za specijalni slučaj $V = \textit{konstanta}$ svagdje. Bez bitnog gubitka općenitosti, možemo odabrati $V = 0$. Ta "slobodna rješenja" su ravni valovi u obliku kompleksnih eksponencijala, naime (8.3) odnosno (8.4),

$$\psi_{\pm k}(x,t) = A\, e^{\pm \mathrm{i}\, k\, x}\, e^{-\mathrm{i}\,\omega\, t} = \varphi_{\pm k}(x)\, e^{-\mathrm{i}\, t E/\hbar} \qquad (\text{gdje } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) \tag{8.25}$$

kada smo u jednoj dimenziji. Već smo u podsekciji 6.2.2, kao i malo prije u podsekciji 8.4, vidjeli da je poopćenje na više dimenzija lagano. U svakom slučaju, ravni valovi su svojstvene funkcije operatora energije (8.7) zahvaljujući vremenski ovisnom faktoru u (8.4) i (8.25), kao i u (6.21), naime $\exp(-\mathrm{i}\,\omega\, t) = \exp(-\mathrm{i}\, tE/\hbar)$. Taj je faktor **isti** bez obzira na dimenzionalnost prostora. Što se pak tiče superpozicijâ ravnih valova, znamo da one rješavaju slobodne vremenski ovisne Schrödingerove jednadžbe. Međutim, ako želimo da superpozicija ima točno određenu energiju E (pa da i ona bude svojstvena funkcija energije), nju mogu sačinjavati samo ravni valovi iste veličine impulsa p odnosno valnog broja k, jer E ovisi o k^2. U jednoj dimenziji, to je samo par dat simbolom $\psi_{\pm k}$ u (8.25). Zato

$$\Psi_E(x,t) \;=\; \tilde{C}_k\, \psi_k(x,t) + \tilde{C}_{-k}\, \psi_{-k}(x,t) \;=\; \varphi_E(x)\, e^{-\mathrm{i}\, t E/\hbar}\,, \tag{8.26}$$

gdje $E = \hbar^2 k^2/2m$ i gdje

$$\varphi_E(x) \;=\; \tilde{C}_k\, \varphi_k(x) + \tilde{C}_{-k}\, \varphi_{-k}(x) \;=\; C_k\, e^{\mathrm{i}\, k\, x} + C_{-k}\, e^{-\mathrm{i}\, k\, x} \tag{8.27}$$

$$\;=\; a_k\, \cos kx + b_k\, \sin kx\,, \tag{8.28}$$

uz odgovarajuće transformacije između (općenito kompleksnih) koeficijenata $\tilde{C}_{\pm k}, C_{\pm k}$ i a_k, b_k – vidi Zadatak 8.4.

Uz takvu funkciju stanja $\Psi_E(x,t)$ (8.26) u vremenski ovisnoj slobodnoj Schrödingerovoj jednadžbi (8.8), vremenska derivacija (puta $\mathrm{i}\hbar$) se potroši djelovanjem na t-ovisan faktor $\exp(-\mathrm{i}\,\omega\,t) = \exp(-\mathrm{i}\,tE/\hbar)$, odakle samo skine faktor E. Potom kraćenje $\exp(-\mathrm{i}\,tE/\hbar)$ daje najjednostavniju, slobodnu *vremenski neovisnu* Schrödingerovu jednadžbu, za vremenski neovisni dio $\varphi_E(x)$ svojstvenog stanja energije (8.26):

$$\hat{H}_0\,\varphi_E(x) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\varphi_E(x) = E\,\varphi_E(x) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\varphi_E(x) = -\,k^2\,\varphi_E(x)\,. \tag{8.29}$$

Općenito rješenje ove svojstvene jednadžbe je očito superpozicija (8.27) dvije konjugirane kompleksne eksponencijale $\exp(\pm\mathrm{i}\,k\,x)$, odnosno ekvivalentno, odgovarajućih sinusa i kosinusa (8.28). Pritom su svojstvene vrijednosti energije slobodne čestice, $E = \hbar^2k^2/2m$, pa zato i impulsa $p = \hbar\,k$, **kontinuirane**, te mogu poprimiti bilo koju vrijednost, jer na njih nisu nametnuti nikakvi rubni uvjeti. (Usporedi to sa slučajem vezanog stanja u Sekciji 8.6.)

8.5.2 Slučaj vremenski neovisne, ali inače proizvoljne potencijalne energije V

U tom slučaju, za bilo koji broj prostornih dimenzija, rješenje tražimo metodom separacije varijabli; konkretno, separiramo vremensku varijablu t od prostornih varijabli. Dakle, za **vOSj** (8.24) pretpostavljamo rješenje faktoriziranog oblika

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = \varphi(\boldsymbol{r})\,\mathcal{T}(t)\,. \tag{8.30}$$

Naravno, takav oblik rješenja, s $\mathcal{T}(t) = \exp(-i\omega t) = \exp(-iEt/\hbar)$, već smo našli kod ravnih valova zapisanih kompleksnom eksponencijalom, (8.3)-(8.4) i (6.21), a na takva smo se rješenja (8.25)-(8.26) podsjetili i u prethodnoj podsekciji. No, to su bila rješenja samo za slobodnu česticu gdje $V = 0$ (ili najviše $V = konstanta$) svagdje, u cijelom prostoru. Nekonstantna potencijalna energija V, ovisno o tome kakva je, dovodi do bitno drugačijeg prostorno ovisnog faktora $\varphi(\boldsymbol{r})$.

Uvrštenjem tog separiranog oblika (8.30) u vremenski ovisnu Schrödinge-

rovu jednadžbu (8.24), te dijeljenjem s istim oblikom (8.30), dobivamo

$$i\hbar\,\frac{1}{\mathcal{T}(t)}\,\frac{\partial\mathcal{T}(t)}{\partial t}=\frac{1}{\varphi(\boldsymbol{r})}\,\hat{H}(\boldsymbol{r},-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\,\varphi(\boldsymbol{r})\,. \tag{8.31}$$

Lijeva strana ove jednadžbe je funkcija samo vremena t, a desna strana funkcija samo vektora položaja $\boldsymbol{r}$. *Takva jednadžba može biti zadovoljena samo ako su obije strane jednake istoj konstanti* (tzv. konstanti separacije). Ona ima dimenziju energije pa ju nazovimo E, iako u ovom času u principu još ne znamo da će se malo niže pokazati da je ta konstanta upravo energija.

Dakle, dobivamo dvije svojstvene jednadžbe: svojstvenu jednadžbu operatora Hamiltonijana,

$$\hat{H}\,\varphi(\boldsymbol{r})=E\,\varphi(\boldsymbol{r})\,, \tag{8.32}$$

te onu za vremenski ovisnu funkciju $\mathcal{T}(t)$, koja je toliko jednostavna da joj je rješenje očito:

$$\frac{\partial\mathcal{T}(t)}{\partial t}=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,E\,\mathcal{T}(t)\quad\Longrightarrow\quad\mathcal{T}(t)\equiv\mathcal{T}_E(t)\,=\,e^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\,=\,e^{-\mathrm{i}\omega t}\,. \tag{8.33}$$

To nam je rješenje već poznato iz specijalnih slučajeva. Identično je kompleksnoj eksponencijali koja nosi vremensku ovisnost monokromatskog putujućeg ravnog kvantnog vala, gdje $\omega=E/\hbar$, u (8.3) odnosno (8.4), kao i vremensku ovisnost superpozicije (8.26) ravnih valova istog k u prethodnoj podsekciji.

Usporedba jednadžbe (8.33) sa svojstvenom jednadžbom (8.7) indicira da je E baš energija, jer smo tamo $i\hbar\partial/\partial t$ identificirali s operatorom energije. U jednadžbi (8.32) pak figurira operator Hamiltonijana $\hat{H}$, dakle opet operator energije (ali izražen preko koordinata i njihovih derivacija), što također ukazuje da E valja interpretirati kao energiju. Da je E *točno* svojstvena vrijednost energije, vidi se iz limesa vrlo visokih vrijednosti E, gdje se mora prijeći u limes klasične fizike, jer tamo je Hamiltonijan bez daljnjega energija.

Jednadžba (8.32) je takva da operator $\hat{H}$ djelujući na funkciju $\varphi(\boldsymbol{r})$ nema drugog efekta osim množenja funkcije $\varphi(\boldsymbol{r})$ brojem E. (Za razliku od slučajeva (8.13) i (8.8) gdje je bilo $V=0$ pa je funkcija bila ravni val, sada govorimo sasvim općenito jer $\hat{V}$, pa dakle ni $\hat{H}$, a onda ni φ, nisu specificirani.) Ako $\varphi(\boldsymbol{r})$ zadovoljava jednadžbu (8.32), to jest, ako joj je zaista rješenje, kažemo da je $\varphi(\boldsymbol{r})$ *svojstvena funkcija* operatora $\hat{H}$ jer se ne mijenja pod njegovim djelovanjem. Jednadžba (8.32) je novi primjer onog što

smo u Podsekciji 8.2 nazvali *svojstvenom jednadžbom*, ili sada malo duže – *jednadžbom svojstvenih vrijednosti*. Pritom je E svojstvena vrijednost operatora Hamiltonijana $\hat{H}$, odnosno svojstvena vrijednost energije koja odgovara funkciji $\varphi(\boldsymbol{r})$, jer za neku drugu vrijednost energije, $\varphi(\boldsymbol{r})$ ne bi bila rješenje. Naravno, može se reći i obratno: funkcija $\varphi(\boldsymbol{r})$ je svojstvena funkcija Hamiltonijana $\hat{H}$ koja odgovara svojstvenoj vrijednosti energije E.

Hamiltonijansku svojstvenu jednadžbu (8.32) nazivamo *vremenski neovisna Schrödingerova jednadžba* (**vNSj**), ili pak (iz razloga koji će postati jasni vrlo brzo), Schrödingerova jednadžba za *stacionarna stanja*.

Za ono što se ponekad [18] naziva *prvi postulat kvantne mehanike*, **vNSj** (8.32) pruža najvažniji primjer: mjerljivoj (opazivoj, opservabilnoj) fizikalnoj veličini zvanoj energija, odgovara *operator energije* (kojeg iz povijesnih razloga nazivamo operator Hamiltonijana, $\hat{H}$). Njegova svojstvena jednadžba (8.32) za rješenje ima *svojstvenu funkciju energije* $\varphi(\boldsymbol{r}) = \varphi_E(\boldsymbol{r})$ kada energija ima iznos E, koji nazivamo *svojstvena vrijednost energije*. **Mjerenja energije daju samo te svojstvene vrijednosti E.** Poopćenje na druge fizikalne veličine ovog upravo rečenog za energiju, daje spomenuti postulat. (Primjer toga smo već upoznali u Sekciji 8.2: operator impulsa $\hat{p}$ djelovanjem na svojstvenu funkciju impulsa, ravni val $\varphi_k(x)$, daje svojstvenu vrijednost impulsa $p = \hbar k$.)

Raspisivanjem operatora Hamiltonijana u potencijalni, multiplikativni dio $V(\boldsymbol{r})$, te u dio kinetičke energije ("slobodni Hamiltonijan") koja je derivativni operator proporcionalan Laplaceovom, **vNSj** (8.32) postaje

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})\right]\,\varphi(\boldsymbol{r}) = E\,\varphi(\boldsymbol{r})\,, \tag{8.34}$$

te ju možemo riješiti kada specificiramo potencijalnu energiju $V(\boldsymbol{r})$ za dati problem. Rješavanjem (8.34) dobijemo spektar mogućih energija, to jest skup vrijednosti E za koje postoje njima odgovarajuća rješenja $\varphi_E(\boldsymbol{r})$, a to su one funkcije $\varphi(\boldsymbol{r})$ koje zadovoljavaju jednadžbu (8.34). Budući da ju zadovoljavaju za određene vrijednosti energije E, vremenski neovisnu Schrödingerovu jednadžbu (8.34) nazivamo svojstvenom jednadžbom energije (ili Hamiltonijana), funkcije $\varphi(\boldsymbol{r}) = \varphi_E(\boldsymbol{r})$ njenim svojstvenim rješenjima ili svojstvenim funkcijama energije, a E svojstvenim vrijednostima energije (Hamiltonijana).

Dakle, približili smo se razini gdje se kvantna mehanika može postaviti kao

sistem nekoliko postulata. Neke nismo spomenuli u dosadašnjim razmatranjima, ali u primjenama ćemo pojasniti što treba na datoj razini. Sjetimo se da smo već došli do jednog od postulata i kada smo uočili da *vremenski ovisna* Schrödingerova jednadžba (8.24) određuje vremenski razvoj kvantnomehaničke valne funkcije $\Psi(\boldsymbol{r},t)$. Sada možemo dati i jednostavnu ilustraciju toga na primjeru stacionarnih stanja. Naime, vidjeli smo da jednadžba (8.33) ima jednostavno oscilatorno rješenje

$$\mathcal{T}_E(t) \;=\; e^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E\,t}\,. \tag{8.35}$$

Prema tome, rješenje (8.30) vremenski ovisne Schrödingerove jednadžbe (8.24), koje odgovara energiji E, dato preko svojstvenog *rješenja vremenski neovisne* Schrödingerove jednadžbe (8.32) odnosno (8.34), glasi:

$$\Psi_E(\boldsymbol{r},t) \;=\; \varphi_E(\boldsymbol{r})\;\, e^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E\,t}\,. \tag{8.36}$$

Znači, rješavanje vremenski neovisne Schrödingerove jednadžbe (8.34) daje nam svojstvene vrijednosti energije E (tj. energetske razine/nivoe) i odgovarajuće svojstvene funkcije $\varphi_E(\boldsymbol{r})$, a vremenska ovisnost (8.35) stacionarnog stanja (8.36) je takva da

$$G_E(\boldsymbol{r},t) \;\equiv\; |\Psi_E(\boldsymbol{r},t)|^2 \;=\; |\varphi_E(\boldsymbol{r})|^2 \;=\; G_E(\boldsymbol{r})\,. \tag{8.37}$$

Dakle, gustoća vjerojatnosti nalaženja čestice u točki $\boldsymbol{r}$ konstantna je u vremenu za stanje tipa (8.36). To je jedan od razloga zašto se takva stanja zovu *stacionarna stanja*.

Uočite da u stacionarna stanja spadaju i slučajevi koje smo već opširno razmatrali, naime ravni valovi (koji su ujedno i svojstvena stanja operatora linearnog impulsa, te slobodnog Hamiltonijana), kao i posebne superpozicije oblika (8.26)-(8.28). To su sve svojstvena stanja slobodnog Hamiltonijana točno određene energije $E = \hbar^2k^2/2m$. Dakle, to su primjeri za koje smo već riješili Schrödingerove jednadžbe, i vremenski neovisnu i vremenski ovisnu.

Također smo pokazali da općeniti valni paket, to jest proizvoljna superpozicija (6.14) ravnih valova, zadovoljava *slobodnu* vremenski ovisnu Schrödingerovu jednadžbu, ali naravno ne zadovoljava vremenski neovisnu Schrödingerovu jednadžbu, jer nema određenu svojstvenu energiju E i nije stacionarno stanje.

Onu svojstvenu funkciju $\varphi(\boldsymbol{r})$ kojoj odgovara određena *svojstvena vrijednost* E označimo simbolom $\varphi_E(\boldsymbol{r})$ da bismo ju razlikovali od drugih svojstvenih funkcija $(\varphi_{E'}(\boldsymbol{r}), \varphi_{E''}(\boldsymbol{r}), \varphi_{\widetilde{E}}(\boldsymbol{r}), ...)$ koje odgovaraju nekim drugim svojstvenim vrijednostima energije $(E', E'', \widetilde{E}, ...)$.

Razne svojstvene vrijednosti mogu biti **diskretne** ili **kontinuirane**, ovisno o tome moraju li (ili ne) zadovoljavati neke rubne uvjete, i kakve.

Dosad smo se sretali samo s kontinuiranim svojstvenim vrijednostima energije i impulsa. To je zato što smo upoznali samo rješenja Schrödingerovih jednadžbi za **slobodnu** kvantnu česticu u jednoj ili tri dimenzije. Ta su rješenja ujedno i svojstvene funkcije operatora linearnog impulsa $\hat{p}$ i operatora slobodne, tj. isključivo kinetičke energije Hamiltonijana $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m$ – ili svojstvene funkcije bar samo Hamiltonijana $\hat{H}_0$, kao (8.26)-(8.28) koja je superpozicija doduše različitih svojstvenih stanjâ operatora impulsa (8.25), ali s istim modulom impulsa. Dakle, to su ravni valovi (8.4) u jednoj i (6.21) u tri dimenzije te posebne superpozicije poput (8.26)-(8.28), pa budući da su im moduli impulsâ kontinuirani, kontinuirane su im i energije $E = p^2/2m$, kako smo konstatirali na kraju Podsekcije 8.5.1.

Diskretne svojstvene vrijednosti energije javljaju se kod **vezanih stanja** kvantnih čestica; to jest, kad je u Schrödingerovoj jednadžbi potencijal V takav da može zarobiti, vezati kvantnu česticu u ograničeni dio prostora. Primjer toga je Coulombov potencijal, koji dovodi do toga da elektron vezan u vodikovom atomu ima diskretan skup energija $E_n = -\mathbb{R}/n^2$.

Međutim, na ovom stupnju znanja ne možemo se upuštati u rješavanje Schrödingerove jednadžbe za vodikov atom, nego ćemo pojavu diskretnog spektra energija pokazati i objasniti na najjednostavnijem primjeru vezanog stanja - a to je čestica u beskonačno dubokoj pravokutnoj potencijalnoj jami.

8.6 Najjednostavnije vezano stanje - u beskonačno dubokom pravokutnom potencijalu

Čestica u jednodimenzionalnom prostoru vezana je u beskonačno dubokoj pravokutnoj potencijalnoj jami širine L ako osjeća potencijal

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ \infty & x \leq 0 \text{ ili } x \geq L \end{cases} . \tag{8.38}$$

Vremenski neovisna Schrödingerova jednadžba

$$\hat{H}\,\varphi(x) \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} \;+\; V(x)\varphi(x) \;=\; E\,\varphi(x) \tag{8.39}$$

nam je naravno najjednostavnija unutar potencijalne jame, gdje $V(x) = 0$, jer se tu, za $0 < x < L$, svodi na isti oblik kao i slobodna **vNSj** (8.29),

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\varphi(x) = -\,k^2\,\varphi(x) \qquad \text{gdje} \qquad k^2 = \frac{2m\,E}{\hbar^2}. \tag{8.40}$$

Zato i rješenje tu mora biti istog *oblika* kao (8.28),

$$\varphi(x) = C_k\,e^{\mathrm{i}\,k\,x} + C_{-k}\,e^{-\mathrm{i}\,k\,x} = a_k\,\cos kx + b_k\,\sin kx. \tag{8.41}$$

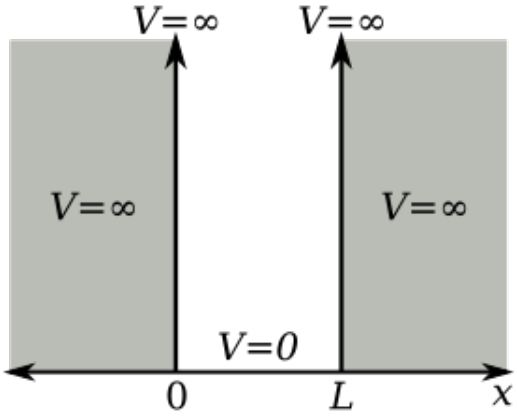
Međutim, za razliku od $\varphi_E(x)$ (8.28) u Podsekciji 8.5.1, ovdje (8.41) *nije* slobodno rješenje, jer **mora ispunjavati i rubne uvjete**: $\varphi(x)$ mora iščezavati na rubovima jame, $\varphi(0) = \varphi(L) = 0$, jer je nužno $\varphi(x) = 0$ svagdje gdje je $V(x)$ beskonačan. Inače bi takav potencijal preko člana $V(x)\varphi(x)$ dovodio do nemogućeg stanja beskonačne energije, $E = \infty$, čim valna funkcija $\varphi(x) \neq 0$ bilo gdje u područjima $x \leq 0$ i $x \geq L$, gdje $V(x) = \infty$.

Iz rubnog uvjeta $\varphi(0) = 0$ slijedi $a_k = 0$. Iz rubnog uvjeta $\varphi(L) = 0$ pak slijedi da $kL = n\pi$. Dakle, k mora biti diskretan, $k \to k_n = n\pi/L$, pa u rješenju (8.41) $\varphi(x) \to \varphi_{E_n} \propto \sin k_n x$. Time konačno funkcija (8.41) zadovoljava ne samo svojstvenu jednadžbu **vNSj** (8.39) nego i rubne uvjete, i to uz diskretne svojstvene vrijednosti energije, $E \to E_n = \hbar^2\,k_n^2/2m$:

$$k_n = n\,\frac{\pi}{L} \quad \Longrightarrow \quad E_n = n^2\,\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \;\equiv\; n^2\,E_1\;, \quad n \in \mathbb{N}\;. \tag{8.42}$$

Odgovarajuće valne funkcije vezanog stanja φ_{E_n} su svojstvene funkcije energije. One su, uz svoje svojstvene energije (8.42), riješile vremenski neovisnu Schrödingerovu jednadžbu za konkretan potencijal (8.38) i rubne uvjete:

$$\hat{H}\,\varphi_{E_n}(x) \;=\; E_n\,\varphi_{E_n}(x)\;. \tag{8.43}$$



Slika 8.1: Pravokutna jama zidova neprobojnih za kvantnu česticu mase m, tj. potencijalna jama beskonačne dubine odnosno beskonačno visokih zidova. (Izvor: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Infinite_potential_well.svg)

8.6.1 Svojstvene funkcije Hamiltonijana ove jame

Te svojstvene funkcije φ_{E_n}, kao i njima odgovarajuće energije E_n (8.42), čine beskonačan, ali prebrojiv, diskretan skup:

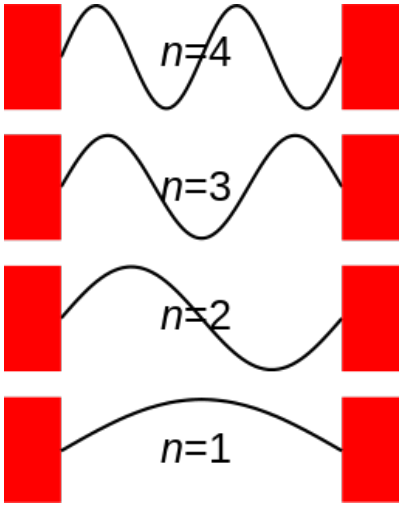
$$\varphi(x) \to \varphi_{E_n}(x) \equiv \varphi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}}\, \sin\left(n\, \frac{\pi}{L}\, x\right) & 0 < x < L \\ 0 & x < 0 \ \text{ili} \ x > L \end{cases} . \quad (8.44)$$

Tu je $\sqrt{2/L} = \mathscr{N}$ konstanta normiranja. Ista je $\forall\, n \in \mathbb{N}$ u (8.44). Time je svaka svojstvena funkcija $\varphi_n(x)$ normirana na jedinicu u skladu s (7.13), jer

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\varphi_n(x)|^2 \ &= \ \int_0^L dx\, |\varphi_n(x)|^2 \ \equiv \ \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle \\ &= \ \int_0^L dx\, \left| \mathscr{N}\, \sin\left(n\, \frac{\pi}{L}\, x\right) \right|^2 \ = \ |\mathscr{N}|^2\, \frac{1}{2}\, L \ = \ 1\,. \end{aligned} \quad (8.45)$$

Za $n \neq l$ stanja su ortogonalna zbog ortogonalnosti sinusâ različitih harmoničkih indeksâ n i l:

$$\langle \varphi_n | \varphi_l \rangle \ \equiv \ \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi_n^*(x)\, \varphi_l(x) \ = \ \int_0^L dx\, \varphi_n^*(x)\, \varphi_l(x) \ = \ 0\,, \qquad \forall\, n \neq l \in \mathbb{N}\,. \quad (8.46)$$



Slika 8.2: Valne funkcije kvantona zarobljenog u pravokutnoj jami neprobojnih zidova, tj. u potencijalu beskonačne visine. Prikazane su četiri najniže svojstvene funkcije energije (8.44). Očito su iste kao prva četiri moda titranja strune fiksiranih krajeva. Tako i mora biti, jer iste jednadžbe imaju ista rješenja. (Izvor: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Particle_in_a_box_wavefunctions_2.svg)

Pomoću Kroneckerovog simbola δ_{nl},

$$\delta_{nl} = \begin{cases} 1 & n = l \\ 0 & n \neq l \end{cases} \quad , \tag{8.47}$$

relaciju normiranosti (8.45) i relaciju ortogonalnosti (8.46) možemo zajedno zapisati kao jedinstvenu relaciju ortonormalnosti

$$\langle \varphi_n | \varphi_l \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi_n^*(x)\, \varphi_l(x) \;=\; \int_0^L dx\, \varphi_n^*(x)\, \varphi_l(x) \;=\; \delta_{nl}\,, \qquad \forall\, n, l \in \mathbb{N}\,. \tag{8.48}$$

U skladu s (8.36), vremenska ovisnost n-tog stacionarnog stanja data je s

$$\psi_n(x,t) \;=\; \varphi_n(x)\; e^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} E_n\, t}\,. \tag{8.49}$$

Prema tome, budući da $|e^{\mathrm{i}\phi}| = 1$, za kvantnu česticu u n-tom svojstvenom stanju (8.44) energije, gustoća vjerojatnosti za nalaženje u točki x, $G_n(x) = |\psi_n(x,t)|^2$, daje vremenski neovisan izraz $|\varphi_n(x)|^2$. Naravno, ovo je samo jedna konkretna realizacija općenite relacije (8.37) za stacionarna stanja.

8.6.2 Superpozicije svojstvenih funkcija Hamiltonijana

Svaka linearna superpozicija takvih svojstvenih stanja energije, tj., mješavina gdje koeficijenti $\mathtt{b}_n$ odražavaju njihove relativne zastupljenosti i faze,

$$\Psi(x,t) \,=\, \sum_n \mathtt{b}_n\, \psi_n(x,t) \,=\, \sum_n \mathtt{b}_n\, e^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n\, t}\, \varphi_n(x)\,, \quad (\mathtt{b}_n = \text{konstanta}, \forall\, n)\,, \tag{8.50}$$

također je rješenje **vremenski ovisne** Schrödingerove jednadžbe za beskonačno dubok pravokutni potencijal (8.38). Međutim, to nije svojstveno rješenje vremenski neovisne Schrödingerove jednadžbe, nema određenu (to jest - svojstvenu) energiju, te nije stacionarno stanje, za razliku od (8.49) odnosno (8.44). Naime, ako superpoziciju (8.50) dignemo na apsolutni kvadrat da dobijemo njenu gustoću vjerojatnosti nalaženja u točki x,

$$G(x,t) \,=\, |\Psi(x,t)|^2 \,=\, \sum_n \sum_l \mathtt{b}_n^*\, \mathtt{b}_l\, e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_n - E_l)\, t}\, \varphi_n(x)^* \varphi_l(x)\,, \tag{8.51}$$

tu vremenska ovisnost preživljava u eksponencijalama jer dvostruka suma sadrži križne članove gdje $E_n \neq E_l$.

Međutim, ovdje možemo pojasniti pitanje iz prošlog poglavlja: kako vremenska ovisnost nestane iz izraza (7.13) za normu **općenite** valne funkcije? To jest, i za funkcije koje **ne** odgovaraju stacionarnim stanjima (8.36), nego poput (8.50) daju vremenski ovisne gustoće vjerojatnosti (8.51).

Da bismo dobili normu superpozicijske funkcije $\Psi(x,t)$ (8.50), integrirajmo njenu t-ovisnu gustoću (8.51):

$$||\Psi||^2 \,=\, \langle\Psi|\Psi\rangle \,=\, \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx \,=\, \sum_n \sum_l \mathtt{b}_n^*\, \mathtt{b}_l\, e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_n - E_l)\, t}\, \langle\varphi_n|\varphi_l\rangle\,. \tag{8.52}$$

U ovom slučaju imamo na raspolaganju relaciju ortonormiranosti (8.48), pa $\langle\varphi_n|\varphi_l\rangle = \delta_{nl}$ ubija jednu sumu, a preživi samo suma članova gdje $n = l$. Zato su eksponencijale (od $E_n - E_n = 0$) reducirane na 1, te vidimo kako se izgubi vremenska ovisnost i u normama nestacionarnih stanja (8.50). Na koncu dobivamo

$$||\Psi||^2 \,=\, \langle\Psi|\Psi\rangle \,=\, \sum_n |\,\mathtt{b}_n\,|^2 \qquad (= 1 \text{ zbog normiranja}). \tag{8.53}$$

Ovo je važna relacija jer pokazuje da su apsolutne vrijednosti kompleksnih koeficijenata razvoja $\mathtt{b}_n$ ograničene normiranjem funkcije – sjetimo se (7.13).

Budući da su koeficijenti $\mathtt{b}_n$ konstantni u vremenu, možemo ih dobiti iz valne funkcije (8.50) u bilo kojem času t. Najmanje je pisanja za $t = 0$, kada

$$\Psi(x,0) \;=\; \sum_l \mathtt{b}_l\, \psi_l(x,0) \;=\; \sum_l \mathtt{b}_l\, \varphi_l(x) \;\equiv\; \Psi(x)\,. \tag{8.54}$$

Zbog relacije ortonormalnosti (8.48), očito je koeficijent $\mathtt{b}_n$ dat skalarnim produktom (7.27) funkcijâ $\varphi_n(x)$ i $\Psi(x,0)$:

$$\mathtt{b}_n \;=\; \langle \varphi_n(x) | \Psi(x,0) \rangle \;=\; \sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L \sin(n\,\frac{\pi}{L}\,x)\, \Psi(x,0)\, dx\,, \qquad \forall\, n \geq 1\,. \tag{8.55}$$

8.6.3 Postoje poopćenja na realistične vezane sustave

Rezultati ove sekcije su važni jer se prilično lako poopće na realistične sustave. Na primjer, može se vidjeti da diskusija u ovoj podsekciji vrijedi za *svaki vremenski neovisan* potencijal bez obzira na broj prostornih dimenzija. Zbog linearnosti vremenski ovisne Schrödingerove jednadžbe, superpozicija njenih rješenja $\Psi_E(\boldsymbol{r},t)$ (8.36), koja su stacionarna stanja sa svojstvenim energijama iz skupa $\{E\}$ (tj. iz *spektra svojstvenih energija*, kao što je primjerice (8.42)),

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) \;=\; \sum_E \mathtt{b}_E\, \Psi_E(\boldsymbol{r},t) \;=\; \sum_E \mathtt{b}_E\, \varphi_E(\boldsymbol{r})\; e^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} E\, t}\,, \tag{8.56}$$

također je njeno rješenje, ali nije stacionarno stanje, niti ima određenu energiju, za razliku od $\Psi_E(\boldsymbol{r},t)$ i $\varphi_E(\boldsymbol{r})$.

Da bismo diskusiju iz prethodne podsekcije ponovili za *svaki vremenski neovisan* potencijal, i to bez obzira na broj prostornih dimenzija, nedostaje nam samo dokaz relacije ortogonalnosti za općenite svojstvene funkcije energije,

$$\langle \varphi_E | \varphi_{E'} \rangle \;=\; \delta_{EE'}\,. \tag{8.57}$$

Može se pokazati da to doista vrijedi za sve realistične Hamiltonijane.

Međutim, ovdje se nećemo upuštati niti u dokazivanje te relacije, niti u traženje konkretnih rješenja φ_E i njihovih svojstvenih energija E za druge potencijale V osim najjednostavnijih: (8.38), te $V = 0$ za slobodne čestice.

8.7 Uz Schrödingerovu, postoje i druge kvantne valne jednadžbe

Sadržaji sekcijâ 8.2, 8.3 i 8.4 sugeriraju da se kvantnomehaničke jednadžbe dobivaju sistematski ako se relacije klasične mehanike pretvaraju u operatore koji djeluju na amplitude vjerojatnosti – i to na način da se linearni impuls p i energija E u klasičnim formulama ovako zamijene pripadnim operatorima derivacijâ po prostoru i vremenu:

$$p \to \hat{p} \equiv -\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}\,, \qquad E \to \hat{E} \equiv \mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,. \tag{8.58}$$

Ovakvi diferencijalni operatori naravno nemaju dobro definirano značenje kad stoje sami, nego moraju djelovati na nešto. Očito, operatori iz (8.6), (8.7) i (8.58) svojim deriviranjem daju nešto različito od nule samo kad djeluju na neke *funkcije vremena i prostora* $\Psi(x,t)$. Opet ističemo da to nisu nužno svojstvene funkcije, iako u (8.6) i (8.7) jest tako.

Heuristička argumentacija kojom se u Poglavlju 6 došlo do prijedloga nerelativističke Schrödingerove jednadžbe za kvantnu česticu, time se svodi na kompaktno pravilo zamjene (8.58) u klasičnim relacijama koje povezuju energiju i impuls čestice mase m. Da to pravilo nije podešeno samo za Schrödingerovu jednadžbu, može se vidjeti, na primjer, iz relativistički točne veze između kvadratâ energije, linearnog impulsa i mase slobodne čestice,

$$E^2 \,=\, p^2\,c^2 \,+\, (m\,c^2)^2\,. \tag{8.59}$$

Odatle zamjenama (8.58) dobivamo *relativističku* kvantnu, tzv. (slobodnu) Klein-Gordonovu valnu jednadžbu:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \,-\, \frac{1}{c^2}\,\frac{\partial^2}{\partial t^2} \,-\, \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\Psi(x,t) \,\equiv -\hat{\mathscr{K}}_0\Psi(x,t) \,=\, 0\,, \tag{8.60}$$

gdje je konstantni član (kvadrat recipročne reducirane Comptonove valne duljine $\lambda\!\!\!^{-}_C = \hbar/mc$ čestice mase m) naravno tretiran jednostavno kao multiplikativni operator.

Najjednostavnija rješenja jednadžbe (8.60) su ravni valovi u obliku kompleksne eksponencijale (8.3), dakle slučaj $\Psi(x,t) = \psi_k(x,t)$, ali i njoj pridruženi (kao njen $\mathfrak{Re}$ i $\mathfrak{Im}$ dio) realni kosinusni i sinusni valovi. Možemo

reći da su to sve svojstvene funkcije operatora *kvadarata* energije sa svojstvenom vrijednošću (8.59). Naime, uz primjenu Planck–Einstein–de Broglievih relacija (7.1) lako vidimo da za ta tri izbora $\Psi(x,t)$, Klein-Gordonova jednadžba (8.60) reproducira relativistički točnu vezu između kvadrata energije, linearnog impulsa i mase slobodne čestice (8.59).

Također lako vidimo da u bezmasenoj granici, $m = 0$, iz (8.60) dobivamo valnu jednadžbu dobro poznatu iz klasične elektrodinamike u vakuumu,

$$-\,\Box_1\,\Psi(x,t) \;\equiv\; \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \;-\; \frac{1}{c^2}\,\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\Psi(x,t) = 0\,, \tag{8.61}$$

gdje ulogu funkcije $\Psi(x,t)$ može igrati (i) bilo koja komponenta poljâ sačinjenih (na temeljnoj, kvantnoj razini) od fotonâ: električnog ili magnetskog, ili njima odgovarajućeg vektorskog potencijala $A_\mu(x,t)$. (Isti oblik valne jednadžbe zadovoljavaju i mehanički valovi kao što su zvučni valovi u raznim materijalima, transverzalna i longitudinalna titranja štapova i napetih žica, membrana, itd. Međutim, frekvencije i valne duljine tih klasičnih mehaničkih valova nemaju nikakve veze s Planck–Einstein–de Broglievim relacijama, a njihova brzina nije univerzalna konstanta prirode c, nego je određena svojstvima konkretnog medija koji titra, $c \to v < c$.)

Simbol $\Box_1$ je pokrata za valni (ili - D' Alembertov) diferencijalni operator u jednoj dimenziji. Dodatkom konstante, naime masivnog člana $(mc/\hbar)^2$ dobiva se (slobodni) Klein-Gordonov operator $\hat{\mathscr{K}}_0 \equiv \Box + (mc/\hbar)^2$, u jednadžbi (8.60) također reduciran na jednu prostornu dimenziju.

Klein-Gordonova jednadžba (8.60) vrijedi i za neke masivne vrste čestica u relativističkoj kvantnoj fizici. Međutim, ovdje nas prvenstveno zanima opis kvantnih čestica u nerelativističkom limesu, a on relativističke jednadžbe poput Klein-Gordonove jednadžbe (8.60) reducira na Schrödingerovu jednadžbu (8.62). (Tko želi znati više, neka u Zbirci riješenih zadataka pogleda kako nerelativistički limes Klein-Gordonove jednadžbe daje Schrödingerovu jednadžbu. Inače, ona u nerelativističkom limesu slijedi i iz tzv. Diracove jednadžbe. To je još jedna relativistička kvantna jednadžba, i to važnija u primjenama od Klein-Gordonove, jer opisuje relativističke elektrone (i općenito fermione) ali nam je konceptualno nešto teže dohvatljiva s ove razine gradiva.)

Podsjetimo se da smo već u prethodnom poglavlju pokazali da ravni val u obliku kompleksne eksponencijale (8.3) zadovoljava i diferencijalnu jed-

nadžbu gibanja, tzv. *slobodnu vremenski ovisnu Schrödingerovu jednadžbu* (6.11), odnosno (8.8). Ovdje prepisujemo (8.8) definirajući slobodni Schrödingerov operator $\hat{\mathscr{S}}_0$ preko operatora slobodnog Hamiltonijana $\hat{H}_0$:

$$\hat{\mathscr{S}}_0\,\Psi(x,t) \equiv \left(\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0\right)\Psi(x,t) = \left(\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\Psi(x,t) = 0\,. \tag{8.62}$$

Tu jednadžbu zadovoljava valna funkcija slobodne kvantne čestice mase m koja se nerelativistički giba u jednoj dimenziji. Uvrštavanjem $\Psi(x,t) = \psi_k(x,t)$ lako provjerimo da ta jednadžba reproducira nerelativistički analog veze (8.59), to jest relaciju $E = T = p^2/2m$ između *nerelativističke* kinetičke energije i impulsa p *slobodne* (stoga $E = T$) masivne kvantne čestice. Zato je ravni val $\psi_k(x,t)$ (8.3), koji ima određeni linearni impuls p i određenu (slobodnu, tj. čistu kinetičku) energiju $p^2/2m$, osnovni val vjerojatnosti za slobodne kvantne čestice. Međutim, još u prošlom poglavlju smo vidjeli da slobodnu Schrödingerovu jednadžbu zadovoljavaju i sve njihove superpozicije poput (6.13) odnosno (6.14).

Nasuprot tome, tu jednadžbu **ne zadovoljavaju kosinusni i sinusni valovi** pridruženi kompleksnoj eksponencijali (8.3), tj. ne zadovoljava ju ni njen realni ni njen imaginarni dio svaki za sebe. Lako je vidjeti da samo kompleksne funkcije mogu zadovoljiti jednadžbu (8.62), a realne funkcije, kao ni imaginarne, to nikako ne mogu, jer operator vremenske derivacije na lijevoj strani te jednadžbe množi imaginarna jedinica, i, a realni operator prostornih derivacija na desnoj strani ju ne sadrži. (Naravno, možemo valnu funkciju $\Psi(x,t)$ rastaviti na realni i imaginarni dio, što se često i radi, osobito u numeričkim računima. No, tada se dobiju *dvije* realne funkcije, $\mathfrak{Re}\Psi(x,t)$ i $\mathfrak{Im}\Psi(x,t)$, koje moraju biti rješenja ekvivalentnog sustava od dvije vezane jednadžbe – vidi zadatak 8.3)

To očigledno favorizira kompleksnu eksponencijalu (8.3) kao oblik ravnog vala relevantnog za kvantne valove vjerojatnosti slobodnih masivnih čestica. (To tim prije, što svojstvene jednadžbe (8.6) i (8.7) indiciraju da funkcije ψ_k (8.3) točno opisuju stanje onih slobodnih kvantnih čestica koje imaju točno određen impuls, pa time i točno određenu energiju.)

Nas međutim zanimaju ne samo ravni valovi, nego i općenite valne funkcije nerelativističkih kvantona. U prošlom smo poglavlju, u biti samo na osnovi linearnosti, samo provjerili da i superpozicije ravnih valova zadovoljavaju

slobodnu Schrödingerovu jednadžbu. Zato ćemo se u sljedeća dva poglavlja upoznavati s nekim metodama matematike i teorijske fizike važnima za detaljniji opis i proučavanje valova složenijih od monokromatskih (8.3), a koji se gibaju po diktatu slobodnih jednadžbi poput (8.62).

8.8 Zadaci 8

8.1) a) Pokažite da su ravni val $\psi_k(x,t)$, kao i njegov vremenski neovisni dio $\varphi_k(x)$, svojstvene funkcije i operatora slobodnog Hamiltonijana $\hat{H}_0$.

b) Nabrojite sve do sada spomenute operatore kojima je $\psi_k(x,t)$ svojstvena funkcija, te one kojima je $\varphi_k(x)$ svojstvena funkcija. Koje su im svojstvene vrijednosti?

8.2) Zamislite da slobodnu Schrödingerovu jednadžbu, odnosno slobodni Schrödingerov operator $\hat{\mathscr{S}}_0$ (8.62) modificirate dodatkom *konstantne* potencijalne energije, $V = konstanta$. Kako se rješenja Schrödingerove jednadžbe promjene zbog toga, a kako odnos energije i linearnog impulsa?

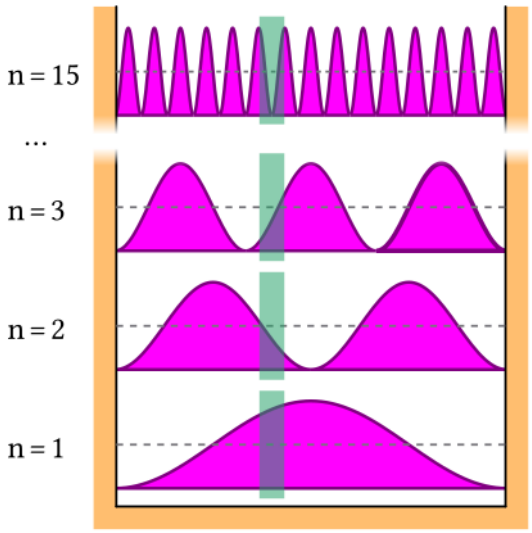
8.3) Nađite sustav vezanih jednadžbi za realne funkcije $\mathfrak{Re}\Psi(x,t)$ i $\mathfrak{Im}\Psi(x,t)$, koji je ekvivalentan Schrödingerovoj jednadžbi za $\Psi(x,t)$.

8.4) Nađite vezu između koeficijenata $C_{\pm k}, \tilde{C}_{\pm k}$, te koeficijenata a_k i b_k, u jednadžbi (8.28).

8.5) Nađite prosječne vrijednosti (očekivane vrijednosti) koordinate x za sva svojstvena stanja energije kvantne čestice vezane u beskonačno dubokom pravokutnom potencijalu (8.38).

Rješenje: Svojstvene funkcije su (8.44) odnosno (8.49), pa 1-dimenzionalna verzija izraza (7.16) daje

$$\begin{aligned} \langle x\rangle_{\psi_n} \;&\equiv\; \langle\psi_n|\, x\,|\psi_n\rangle \;=\; \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x,t)^*\, x\, \psi_n(x,t)\, dx \qquad (8.63)\\ &=\; \int_0^L x\,|\varphi_n(x)|^2\, dx \;=\; \frac{2}{L}\int_0^L x\,\sin^2(n\,\frac{\pi}{L}\,x)\, dx\,. \end{aligned}$$



Slika 8.3: Kvadrati (8.44): $|\varphi_n(x)|^2 = (2/L)\sin^2(n\pi x/L)$, to jest, gustoće vjerojatnosti nalaženja kvantona zarobljenog u pravokutnoj jami širine L a neprobojnih zidova, tj. u potencijalu beskonačne visine, za $n = 1, 2, 3$ i 15. Očita je simetrija svih gustoća s obzirom na središte potencijala u $x = L/2$. Istaknuti interval pokazuje, u skladu s principom korespondencije, da s povećanjem kvantnog broja n, vjerojatnost u intervalu teži vjerojatnosti nalaženja klasične čestice (= širina intervala/L). (Izvor: MikeRun - Own work, curve taken from, CC BY-SA 4.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=101306335)

Upotrebom neodređenog tabličnog integrala

$$\int x\,\sin^2(u\,x)\,dx \;=\; \frac{x^2}{4} - \frac{x\,\sin(2\,u\,x)}{4\,u} - \frac{\cos(2\,u\,x)}{8\,u^2} \tag{8.64}$$

uz $u = n\pi/L$, te gornju granicu $x = L$ i donju granicu $x = 0$ dobivamo da u svim svojstvenim stanjima (8.44) $\forall n$, prosjek odnosno očekivana vrijednost položaja je na sredini potencijalne jame:

$$\langle x\rangle_{\psi_n} \;=\; \frac{L}{2}\,, \tag{8.65}$$

što smo mogli i prije izračuna (8.63) proreći zbog geometrijske simetrije, vidi Sliku 8.3 i naravno formulu gustoće vjerojatnosti $|\varphi_n(x)|^2 \propto \sin^2(n\pi x/L)$.

Poglavlje 9

Neki osnovni aspekti valnog formalizma

U prethodnim smo poglavljima vidjeli da su, uz monokromatske ravne valove, i njihove linearne superpozicije rješenja slobodne Schrödingerove jednadžbe. U ovom i u sljedećem poglavlju ćemo detaljnije proučiti ta općenita rješenja, takozvane slobodne valne pakete.

Ponovo ističemo da je slobodna Schrödingerova jednadžba (8.62) linearna i homogena diferencijalna jednadžba, pa je stoga svaka superpozicija njenih rješenjâ također rješenje. Zato ćemo ta njena općenita rješenja pomoću Fourierove analize prikazivati u obliku raznih superpozicijâ (sumâ) ravnih valova $\psi_k(x,t)$ (8.3). Oni su posebna rješenja koja, uz slobodnu Schrödingerovu jednadžbu (8.62), zadovoljavaju i svojstvene jednadžbe linearnog impulsa i energije, (8.6) odnosno (8.7). Dakle, oni odgovaraju stanjima u kojima kvantne čestice imaju određene linearne impulse $p = \hbar k$ i energije $E = \hbar\omega$. Zato imaju temeljno značenje kao valovi vjerojatnosti za slobodne kvantne čestice.

S druge strane, valni paketi - dobiveni superponiranjem ravnih valova *raznih* impulsâ i energijâ - nemaju precizno određene impulse i energije, pa i nisu svojstvene funkcije tih operatora. Međutim, za razliku od monokromatskih ravnih valova, valovi dobiveni njihovim superponiranjem mogu biti lokalizirani na mala prostorna protegnuća. Odatle i potječe ime "valni paketi".

9.1 Prikaz općenitih valova Fourierovim redovima i integralima

Prikaz neke funkcije razvojem preko skupa nekih drugih pogodnih funkcija, i to međusobno ortogonalnih, vrlo je korisna matematička metoda. Najpoznatiji su **Fourierovi redovi**. To su *diskretne* sume preko valnih duljinâ λ_n odnosno valnih brojeva k_n sinusâ i kosinusâ (raznih ekvivalentnih oblika, poput (9.2)-(9.5), ali i (9.15)) koje prikazuju *periodičke* funkcije. Njihove osnove izlažemo u matematičkom Dodatku A, *Osnovno o Fourierovim redovima*, dok ćemo u ovom poglavlju dati samo one elemente koji su potrebni za ovdašnje jednostavne primjene. Onome tko želi znati više, preporučujem razne tipove specijalizirane literature od Kreysziga [36] do Sunka [37].

Funkcija f neke varijable, primjerice vremena t ili koordinate x, je periodička ako je potpuno definirana samo jednim svojim dijelom na varijablinom intervalu duljine Λ; znači, dijelom između $f(x)$ i $f(x+\Lambda)$, koji se ponavlja beskonačno mnogo puta - vidi na primjer Sliku 9.1. Dakle, svaki segment duljine Λ sadrži sve informacije o periodičnoj funkciji. Vrijednost varijable x koja služi da definiramo periodični segment funkcije između $f(x)$ i $f(x+\Lambda)$ očito se može odabrati slobodno, proizvoljno. Duljinu Λ nazivamo *duljinom periodičnosti* funkcije f, ili jednostavno njezinim *periodom*. Međutim, tu duljinu periodičnosti Λ *općenite* periodične funkcije f ne smijemo miješati s valnim duljinama λ_n i harmoničkim periodima τ_n. To *jesu* duljine periodičnosti, ali *osobitih* periodičnih funkcijâ koje su rješenja jednadžbe gibanja harmoničkog oscilatora poput (2.9) ili valne jednadžbe (2.10) – dakle sinusâ i kosinusâ poput (2.8), te odgovarajućih kompleksnih eksponencijalâ $\exp(\pm \mathrm{i}\phi) = \cos\phi \pm \mathrm{i}\sin\phi$. Samo te osobite funkcije su harmonički modovi monokromatskih oscilacijâ s određenim valnim duljinama λ_n odnosno s valnim brojevima $k_n \equiv 2\pi\kappa_n \equiv 2\pi/\lambda_n$; ili, ako je varijabla vrijeme t, s harmoničkim periodima τ_n odnosno s frekvencijama $\omega_n \equiv 2\pi\nu_n \equiv 2\pi/\tau_n$.

I općenite, neperiodičke funkcije možemo prikazati slično kao u izrazima (9.2)-(9.5), no tada s diskretne sume moramo prijeći na odgovarajuću *kontinuiranu sumu*; dakle, na Fourierov *integral* preko kontinuiranih realnih vrijednosti valnih brojeva k, ili preko kontinuiranih frekvencija ω ako Fourier-analiziramo funkcije vremena t. To je metoda **Fourierove transformacije** – vidi podsekciju 9.1.5 i Sekciju 9.4.

9.1.1 Fourierovi redovi sinusâ i kosinusâ

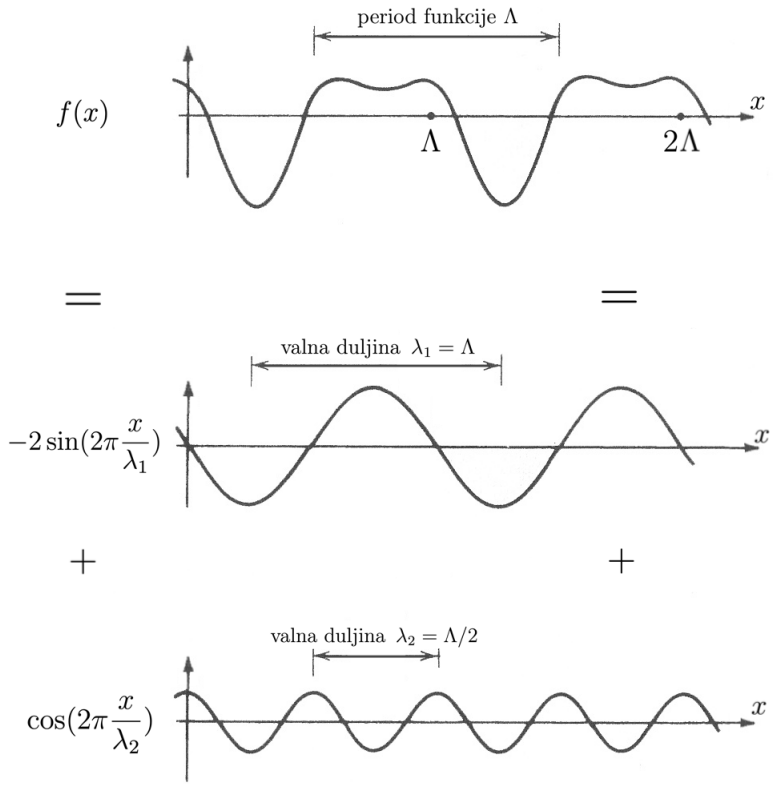
Superpozicija tih harmoničkih modova ("harmonikâ"), pomoću funkciji odgovarajućih koeficijenata a_n i b_n, daje prikaz proizvoljne periodičke funkcije $f(x)$ Fourierovim redom, kojeg dolje pišemo u četiri ekvivalentna oblika: (9.2)–(9.5). Tu sinusi i kosinusi ovise o raznim λ_n odnosno o valnim brojevima k_n, a sume preko njih su diskretne, jer valne duljine λ_n čine diskretan skup, kao i k_n. Naime, u duljinu periodičnosti Λ općenite periodičke funkcije $f(x)$ koju želimo raspisati u sinuse i kosinuse, treba upasati *cijeli broj* valnih duljinâ λ_n, jer one su duljine periodičnosti sinusâ i kosinusâ:

$$\Lambda \,=\, n\,\lambda_n \,\equiv\, \frac{n}{\kappa_n} \,=\, n\,\frac{2\pi}{k_n} \quad \text{gdje} \quad n = 0, 1, 2, \,\ldots\,, \infty\,. \tag{9.1}$$

Valna duljina osnovnog harmoničkog moda ("harmonika") je $\lambda_1 = \Lambda$, dok n-ti harmonik ima n puta kraću valnu duljinu, odnosno n puta veći valni broj. Zato je superpozicija doprinosâ raznih valnih duljinâ λ_n, odnosno valnih brojeva k_n, ekvivalentna zbrajanju po indeksu n harmoničkih modova ("harmonikâ"). Slika 9.1 ilustrira najjednostavniji netrivijalni primjer, Fourierov red od samo dva člana. Međutim, da bi mogao dati *točan* prikaz (skoro) *svake* periodičke funkcije, Fourierov je red u principu zbroj beskonačno mnogo članova – harmoničkih modova. Možemo ga izraziti na više načina. Zbog $\cos(\alpha-\beta) \,=\, \cos\alpha\,\cos\beta \,+\, \sin\alpha\,\sin\beta$, (9.3) je (9.2) uz $A_n\cos\theta_n = a_n\,,\; A_n\sin\theta_n = b_n\,,$ te $A_n = \sqrt{a_n^2 + b_n^2}$ kada $n > 0\,,$ te $A_0 = a_0$, dok (9.1) povezuje (9.2) s (9.4) i (9.5):

$$\begin{aligned}
f(x) \;&=\; \sum_{n=0}^{\infty} \Big[\, a_n \cos\Big(2\pi\, n\,\frac{x}{\Lambda}\Big) + b_n \sin\Big(2\pi\, n\,\frac{x}{\Lambda}\Big)\Big] && (9.2)\\
&=\; A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} A_n\, \cos\Big(2\pi\, n\,\frac{x}{\Lambda} - \theta_n\Big) && (9.3)\\
&=\; \sum_{n=0}^{\infty} \left[\, a_n \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_n}\, x\right) + b_n \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_n}\, x\right)\right] && (9.4)\\
&=\; \sum_{n=0}^{\infty} \left[\, a_{k_n} \cos\left(k_n\, x\right) + b_{k_n} \sin\left(k_n\, x\right)\right]. && (9.5)
\end{aligned}$$

Kosinusi su parne, a sinusi neparne funkcije, pa ekvivalentni zapisi (9.2), (9.4) i (9.5) funkciju f eksplicitno dijele na parni i neparni dio. Budući da



Slika 9.1: Funkcija $f(x)$ bi na primjer mogla opisivati, u nekom *fiksnom* času t, transverzalne pomake zatitrane strune čiji je ravnotežni položaj duž osi x. U superpoziciji opisanoj Fourierovim redom, njenom titranju doprinose titranja raznih harmonikâ, to jest raznih valnih duljinâ λ_n odnosno valnih brojeva k_n, koji daju periodičnost harmoničkih oscilacija u prostoru.
Duljina periodičnosti funkcije je Λ, pa $\lambda_n = \Lambda/n$, gdje $n = 0, 1, 2, ..., \infty$.
Kao primjer Fourierovog reda (9.4), na ovoj je slici prikazan najjednostavniji netrivijalni slučaj – red sa samo dva člana. Konkretno, izabrali smo $f(x) = -2\sin(2\pi x/\lambda_1) + \cos(2\pi x/\lambda_2)$, pa su svi koeficijenti nula, **osim** $a_{\lambda_2} \equiv a_2 = 1$, te $b_{\lambda_1} \equiv b_1 = -2$.
Naravno, to je posljedica ovog *specijalnog izbora* funkcije $f(x)$. Za točno reproduciranje *općenite* periodičke funkcije, u načelu je potreban red gdje broj članova $N \to \infty$. Zaustavljanje na konačnom broju N članova reda znači da (općenitu) funkciju taj red reproducira samo približno.

je **svaku funkciju** zaista moguće zapisati kao zbroj $f = f_+ + f_-$ njenog parnog dijela f_+ i njenog neparnog dijela f_- (vidi riješeni zadatak 9.1), već to indicira da bi zapis funkcije u obliku Fourierovog reda mogao biti jedno rješenje matematičkog problema kako proizvoljnu funkciju (jedne ili više varijabli) izraziti superpozicijom poznatih funkcija.

Naravno, presudno je pitanje mogu li se naći takvi koeficijenti sinusâ i kosinusâ za koje gornje jednakosti vrijede $\forall\, x$.

Fourierovi koeficijenti $a_n \equiv a_{k_n}$ i $b_n \equiv b_{k_n}$ **su**

$$a_0 = \frac{1}{\Lambda}\int_{-\Lambda/2}^{\Lambda/2} f(x)\,dx \equiv \frac{1}{\Lambda}\,\langle 1|f\rangle \qquad (\text{uočite } \cos(0\cdot x)=1)\,, \tag{9.6}$$

$$a_n = \frac{2}{\Lambda}\int_{-\Lambda/2}^{\Lambda/2} f(x)\,\cos(\frac{2\pi}{\Lambda}\,n\,x)\,dx \equiv \frac{2}{\Lambda}\,\langle\cos(k_n x)|f(x)\rangle \quad n\geq 1, \tag{9.7}$$

$$b_n = \frac{2}{\Lambda}\int_{-\Lambda/2}^{\Lambda/2} f(x)\,\sin(\frac{2\pi}{\Lambda}\,n\,x)\,dx \equiv \frac{2}{\Lambda}\,\langle\sin(k_n x)|f(x)\rangle \quad n\geq 1. \tag{9.8}$$

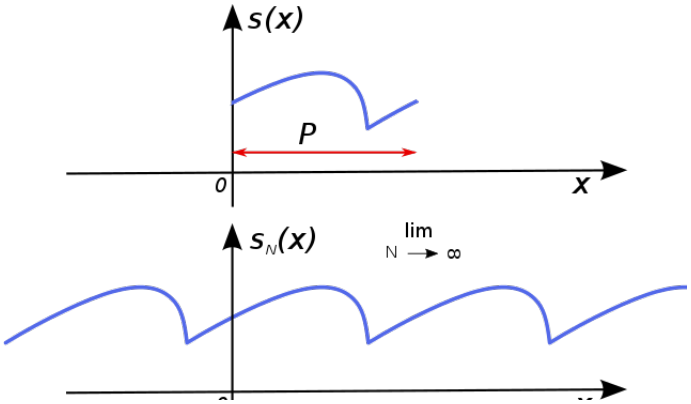
Te izraze samo trenutno dajemo bez izvoda, ali već u podsekciji 9.1.3 izvodimo koeficijente C_k za ekvivalentan Fourierov red kompleksnih eksponencijalâ. Onda se (9.6)-(9.8) mogu dobiti iz izraza (9.20) za C_k i C_{-k}.

Kao drugo, inspekcijom riješenog zadatka 7.2) lako se vidi da gornji izrazi slijede iz relacija ortogonalnosti (7.32)–(7.34) za sinusne i kosinusne funkcije. To se sistematski i detaljno čini u matematičkom Dodatku A, *Osnovno o Fourierovim redovima* – vidi izvod relacija (A.11)-(A.13).

Kao treće, ako se vratimo u prethodno poglavlje, i to na Sekciju 8.6 o beskonačno dubokom pravokutnom potencijalu, uočavamo da je, do na konstantan faktor, tamošnji izraz (8.55) za koeficijente $\mathfrak{b}_n$ ekvivalentan izrazu (9.8) za koeficijente b_n.

9.1.2 Fourierova analiza i pravokutna potencijalna jama

U Sekciji 8.6 smo došli do izraza za općenito rješenje Ψ (8.50), odnosno (8.54), preko argumenta da je linearna superpozicija rješenja također rješenje. Sada trebamo razumjeti da su ti izrazi ujedno i Fourierov razvoj funkcije Ψ.



Slika 9.2: Gornji dio prikazuje neperiodičku funkciju $s(x)$ koja je definirana samo na intervalu od 0 do P. Funkciju se može Fourier-analizirati na tom intervalu, i Fourierov red $s_N(x)$ koji iz toga proizilazi prikazan je na donjem dijelu. On se, za razliku od početne funkcije $s(x)$, periodički ponavlja od $-\infty$ do $+\infty$. Međutim, on reproducira funkciju $s(x)$ na intervalu od 0 do P.
(Izvor: By Bob K - Own work, CC0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=104007140)

No kako je to uopće moguće, jer gdje je tamo periodičnost funkcije, kad je valna funkcija (8.54) $\Psi \neq 0$ samo unutar jame širine L?

– Taj fizikalni primjer, kao i matematički ekvivalentan primjer transverzalnih titranja razapete strune duljine L, te Slika 9.2, ilustrira činjenicu da to što je Fourierov red uvijek periodička funkcija, nije prepreka da na ograničenom intervalu bude koristan prikaz i za neperiodičke (aperiodičke) funkcije definirane na ograničenom intervalu poput $x \in [0, L]$. Funkciju naprosto Fourier-analiziramo i dobivenim redom prikazujemo funkciju samo na tom intervalu. Ne smeta što se Fourierov red (koji je naravno uvijek periodički) ne podudara s našom funkcijom Ψ **izvan** intervala $[0, L]$, nego, primjerice, kao što smo rješenje za Ψ napisali u Sekciji 8.6: $\Psi = 0$ izvan intervala $x \in [0, L]$. Ali **unutar** tog intervala, prostorna ovisnost jest data superpozicijom sinusâ (8.44).

To nas međutim vodi do pitanja duljine periodičnosti Λ u tom problemu. Naime, općenito rješenje Ψ smo tamo raspisali kao superpoziciju (8.54) svojstvenih funkcija (8.44) proporcionalnih $\sin(\pi nx/L) = \sin(2\pi nx/2L)$. Osnovni harmonik, $n = 1$, pokazuje da $\Lambda = 2L$. Fourierov razvoj oblika poput (8.54) u Sekciji 8.6 stoga se naziva "**razvoj na pola intervala**", gdje je funk-

cija od fizikalnog interesa samo na pola intervala periodičnosti. (Za mnoštvo ilustrativnih primjera, vidi [36].)

Možemo uvidjeti ekvivalentnost razvoja na pola intervala sa standardnim oblicima (9.2)–(9.5) kad se prisjetimo da se je iza tih formula istakao značaj izdvajanja parnih i neparnih dijelova. Budući da razvoj (8.54) involvira *samo sinuse*, u standardnom Fourierovom razvoju **na punom intervalu** od $-\Lambda/2 = -L$ do $\Lambda/2 = L$, razvoj (8.54) bi predstavljao *neparnu* funkciju

$$f(x)_{\text{neparna}} = \begin{cases} \Psi(x) & 0 < x < L \\ -\Psi(x) & -L < x < 0 \end{cases} . \tag{9.9}$$

(To je zamišljeni, matematički produžetak funkcije (8.54), a ne fizikalan.)

Kako je umnožak svakog sinusa i neparne funkcije parna funkcija $h(x)_{\text{parna}}$,

$$\int_{-L}^{L} dx\, h(x)_{\text{parna}} = 2 \int_{0}^{L} dx\, h(x)_{\text{parna}}. \tag{9.10}$$

Stoga je koeficijent razvoja na pola intervala 2 puta veći od izraza (9.8), koji se odnosi na standardni razvoj na cijelom intervalu periodičnosti $\Lambda = 2L$.

S tim u vezi, uočimo još da je, za razliku od standardnog Fourierovog razvoja, (8.54) razvoj u svojstvene funkcije $\varphi_n(x)$ (8.44) koje se od čistih sinusa razlikuju za faktor normalizacije $\sqrt{2/L} = \sqrt{4/\Lambda}$. Time do kraja objašnjavamo razliku između koeficijenata $\mathtt{b}_n$ (8.55) i b_n (9.8), što je bio zadnji detalj potreban da do kraja razumijemo sličnosti i razlike između (8.54), tj. razvoja na pola intervala, i standardnog Fourierovog razvoja (9.2).

9.1.3 Fourierov red kompleksnih eksponencijalâ

U kvantnoj mehanici nam trebaju *kompleksne* valne funkcije. Naravno, i njih možemo razviti u realne funkcije, ovdje konkretno u sinuse i kosinuse, jer koeficijenti Fourierovog reda mogu biti kompleksni. Međutim, za razvoj realnih i kompleksnih funkcija u Fourierov red odnosno Fourierov integral, u kvantnoj je fizici osobito pogodna *kompleksna eksponencijala* (9.11). Na primjer, u prethodnom smo poglavlju vidjeli da $\exp(\mathrm{i}Et/\hbar)$ izražava vremensku ovisnost svojstvenih stanja energije, a $\exp(\mathrm{i}px/\hbar)$ je svojstveno stanje linearnog impulsa.

Toj kompleksnoj funkciji realni dio je kosinus, a imaginarni dio sinus:

$$e^{\mathrm{i}\,\theta} = \cos\theta + \mathrm{i}\,\sin\theta\,, \qquad \text{na primjer} \qquad e^{\mathrm{i}\,k\,x} = \cos(k\,x) + \mathrm{i}\,\sin(k\,x)\,, \quad (9.11)$$

pa umjesto Fourierovog reda (9.2)-(9.5) sa sinusima i kosinusima (jednostavan konkretan primjer je na Slici 9.1), funkciju $f(x)$ s duljinom periodičnosti Λ možemo prikazati Fourierovim redom preko kompleksnih eksponencijalâ (9.11)

$$e^{\mathrm{i}\,k\,x} \;=\; e^{\mathrm{i}\,\frac{2\pi\,n}{\Lambda}\,x}\,. \qquad (9.12)$$

Međutim, korisno je protegnuti valni broj i na negativne vrijednosti. Naravno, k je povezan s periodičnosti funkcije $f(x)$ na isti način kao i prije, tj. $k\,\Lambda \;=\; \Lambda\,2\pi/\lambda \;=\; 2\pi\,n$ gdje je n opet cijeli broj, ali sada od $-\infty$ do $+\infty$. Dakle, uključuje i negativne vrijednosti. Moramo uočiti da to predstavlja promjenu notacije u odnosu na k_n u (9.5), jer *sada*

$$k \;=\; 2\pi\,\frac{n}{\Lambda} \;\equiv\; 2\pi\,\kappa \qquad \text{ide od } \; -\infty \; \text{ do } \; +\infty\,. \qquad (9.13)$$

Zato vezu valnog broja k s valnom duljinom $\lambda \geq 0$ definiramo kao $\lambda = 2\pi/|k|$. Da istaknemo promjenu notacije, ispuštamo sa k_n supskript n, iako je k naravno još uvijek diskretan indeks. On se od $n \in \mathbb{Z}$ razlikuje samo za konstantan faktor $2\pi/\Lambda$, pa bijekciju $k \leftrightarrow n$ (9.13) treba uvijek imati na umu (sve dok se ne ode u kontinuiranu granicu, uz $\Lambda \to \infty$). Razlika/promjena harmoničkog indeksa n od jednog do drugog moda je naravno $\Delta n = 1$, pa promjena valnog broja k od jednog harmoničkog moda do sljedećeg iznosi

$$\Delta k \;=\; 2\pi\,\frac{\Delta n}{\Lambda} \;=\; \frac{2\pi}{\Lambda}\,. \qquad (9.14)$$

Zbog parnosti kosinusâ i neparnosti sinusâ lako vidimo da i kosinusno-sinusne sume (9.2) i (9.5) možemo simetrično protegnuti na negativne vrijednosti indeksâ n odnosno k. Zato je Fourierov red za $f(x)$, zapisan kao (9.2) ili (9.5), moguće izraziti i pomoću kompleksnih eksponencijalâ, ovdje u dva ekvivalentna oblika:

$$f(x) \;=\; \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n\, e^{\mathrm{i}\,\frac{2\pi\,n}{\Lambda}\,x} \quad \Longleftrightarrow \quad f(x) \;=\; \sum_{k=-\infty}^{+\infty} C_k\, e^{\mathrm{i}\,k\,x}\,. \qquad (9.15)$$

Usporedbom Fourierovih redova (9.15) sa (9.2)-(9.5), te upotrebom Eulerove formule (9.11), dolazimo do veze između koeficijenata: $C_0 \;=\; a_0\,,$ a za $n > 0\,,$

$$C_n \;=\; C_k \;=\; \frac{1}{2}\,(a_n - \mathrm{i}\,b_n)\;, \qquad C_{-n} \;=\; C_{-k} \;=\; \frac{1}{2}(a_n + \mathrm{i}\,b_n)\,, \qquad (9.16)$$

odnosno

$$a_n \,=\, C_n + C_{-n} \,=\, C_k + C_{-k}\,, \quad b_n \,=\, \mathrm{i}\,(C_n - C_{-n}) \,=\, \mathrm{i}\,(C_k - C_{-k})\,. \tag{9.17}$$

Kompleksne eksponencijale su međusobno ortogonalne. To znači da je skalarni produkt (9.19) jedne takve funkcije s valnim brojem k i druge s k', simbolički napisan $\langle e^{\mathrm{i}\,k\,x}|e^{\mathrm{i}\,k'x}\rangle$, proporcionalan Kroneckerovom simbolu $\delta_{kk'}$ tih valnih brojeva:

$$\delta_{kk'} = \begin{cases} 1 & k = k' \\ 0 & k \neq k' \end{cases} \quad . \tag{9.18}$$

Preciznije: integral druge kompleksne eksponencijale s prvom *kompleksno konjugiranom*, daje Kroneckerov simbol njihovih valnih brojeva puta duljina intervala integracije – znači, puta duljina periodičnosti Λ:

$$\langle e^{\mathrm{i}\,k\,x}|e^{\mathrm{i}\,k'x}\rangle \,\equiv\, \int_d^{\Lambda+d} dx\,(e^{\mathrm{i}\,k\,x})^*\,e^{\mathrm{i}\,k'x} \,=\, \int_d^{\Lambda+d} dx\,e^{\mathrm{i}\,(k'-k)\,x} \,=\, \delta_{kk'}\,\Lambda\,. \tag{9.19}$$

Zato su Fourierovi koeficijenti u Fourierovom redu (9.15) dâti sa

$$C_k \,=\, \frac{1}{\Lambda}\int_d^{\Lambda+d} dx\,e^{-\mathrm{i}\,k\,x}\,f(x) \,\equiv\, \frac{1}{\Lambda}\,\langle e^{\mathrm{i}\,k\,x}|f(x)\rangle\ , \tag{9.20}$$

gdje d predstavlja izbor za donju granicu integracije, pa $\Lambda + d$ mora biti gornja granica. Naravno, najspretnije je duljinu periodičnosti Λ pokriti ili intervalom integracije od ishodišta $x = 0$ do $x = \Lambda$ (tj. $d = 0$), ili pak intervalom integracije smještenim simetrično oko ishodišta $x = 0$ (tj. $d = -\Lambda/2$). Mi ćemo uglavnom birati ovo drugo – simetrično oko ishodišta (osim ako u nekom konkretnom problemu prva mogućnost ne bude tehnički lakša).

U specijalnom slučaju kada je funkcija data redom (9.15) **realna**, (9.20) za koeficijente C_k naravno i dalje vrijedi, no onda zbog $f(x) = f(x)^*$ vrijedi još i $C_k \,=\, C_{-k}^*$, a koeficijenti a_n i b_n su tada realni.

Primijetite da nalaženje i izračun koeficijenata (9.20), budući da praksa pokazuje da oni upotrebom u Fourierovom redu (9.15) zaista reproduciraju periodičke funkcije $f(x)$, predstavlja praktični dokaz za Fourierov red (9.15). Također, kroz relacije (9.17) je iz tih koeficijenata moguće izračunati koeficijente a_n i b_n za ekvivalentne Fourierove "cos-sin" redove (9.2)-(9.5) za $f(x)$. Time su i oni praktički dokazani, iako sistematično izlaganje njihovih osnova odlažemo do Poglavlja A.

9.1.4 Normiranje kompleksnih eksponencijala na konačnom intervalu

Skalarni produkt (9.19) kompleksnih eksponencijala pokazuje da one nisu normirane na jedinicu, pa se time razlikuju do na konstantan faktor od $\varphi_k(x)$, naše konvencije za vremenski neovisni dio ravnog vala, u kojeg smo u relaciji (8.4) uključili konstantu normiranja A. No u trenutnom slučaju gdje pretpostavljamo da radimo s periodičkim funkcijama duljine periodičnosti Λ, (9.19) implicira da je konstanta normiranja $A = \mathscr{N} = 1/\sqrt{\Lambda}$, tako da

$$\varphi_k(x) \;=\; \frac{1}{\sqrt{\Lambda}}\, e^{\,\mathrm{i}\,k\,x}\,, \tag{9.21}$$

gdje je valni broj k diskretni indeks $k = n\,2\pi/\Lambda$, $n \in \mathbb{Z}$, pa su diskretne i svojstvene vrijednosti impulsa $p = \hbar k$. Tako i odgovarajuće svojstvene funkcije $\varphi_k(x)$ (9.21) čine diskretan skup, pa njihovu ortonormiranost izražavamo Kroneckerovim simbolom:

$$\int_{-\Lambda/2}^{\Lambda/2} dx\, \varphi_k(x)^*\, \varphi_{k'}(x) \;\equiv\; \langle \varphi_k(x) | \varphi_{k'}(x) \rangle \;=\; \delta_{kk'}\,. \tag{9.22}$$

Ovakvo normiranje treba usporediti s onim u podsekciji 9.1.6, gdje ravni valovi $\varphi_k(x)$ žive na beskonačnoj domeni, tj. na cijelom brojevnom pravcu od $-\infty$ do $+\infty$.

Iako se radi o slobodnim kvantnim česticama, diskretnost je tu, i to zato što je na funkcije nametnut uvjet periodičnosti s duljinom periodičnosti Λ.

Međutim, neperiodična funkcija je isto što i periodična *s beskonačno velikom duljinom periodičnosti*, pa se uvjet koji dovodi do diskretnosti gasi u limesu $\Lambda \to \infty$. Tada diskretna razlika $\Delta k = 2\pi/\Lambda = 2\pi\kappa$ između valnih brojeva teži u nulu, odnosno postaje beskonačno mali, infinitezimalni diferencijal: $\Delta k \to dk = 2\pi\, d\kappa$. Zato valni brojevi k (i impulsi p) postaju kontinuirani, kao i skup $\{\varphi_k(x)\}$ svojstvenih funkcija impulsa. Fourierovi redovi (9.15) time prelaze iz diskretnih u kontinuirane sume, tj. u Fourierove integrale (9.26) i (9.28) koje ćemo u Sekciji (9.4) primijeniti na kvantne valne funkcije, tj. iskoristiti ih (9.49) da formiramo općenite valne funkcije slobodnih čestica – valne pakete.

Sada učinimo pažljivo taj prijelaz skiciran gore, kojim Fourierov integral dobijemo kao limes Fourierovog reda.

9.1.5 Fourierov transformat

Dakle, funkciju $f(x)$, koja više nije nužno periodična, želimo prikazati kao granični slučaj periodične funkcije koja je jednaka $f(x)$ unutar intervala periodičnosti $[-\Lambda/2, +\Lambda/2]$. To je "stara $f(x)$" koju smo prikazivali Fourierovim redom (9.15), gdje suma ide preko još uvijek diskretnih vrijednosti $k = n\,2\pi/\Lambda$ (9.13). Budući da je periodična s periodom Λ, preimenujmo tu "staru $f(x)$" (9.15) u $f_\Lambda(x)$, ali onda tako trebamo i u izrazu (9.20) za Fourierove koeficijente C_k. U toj revidiranoj notaciji,

$$f_\Lambda(x) \,=\, \sum_{k=-\infty}^{+\infty} C_k\, e^{\mathrm{i}\,k\,x}\,, \quad \text{gdje} \quad C_k \,=\, \frac{1}{\Lambda}\int_d^{\Lambda+d} dx'\, e^{-\mathrm{i}\,k\,x'}\, f_\Lambda(x')\,, \qquad (9.23)$$

gdje smo nijemu varijablu integracije preimenovali, $x \to x'$, da se ne miješa s varijablom u $f_\Lambda(x)$ i $e^{\mathrm{i}\,k\,x}$.

Međutim, ako u izrazu za C_k u (9.23) granice integracije uzmemo od $-\Lambda/2$ do $+\Lambda/2$, uvažimo da je unutar tog intervala $f_\Lambda(x) = f(x)$, pa je izraz za k-ti Fourierov koeficijent (pomoću (9.14) u drugoj jednakosti):

$$C_k \,=\, \frac{1}{\Lambda}\int_{-\Lambda/2}^{+\Lambda/2} dx\, e^{-\mathrm{i}\,k\,x}\, f(x) \,=\, \frac{\Delta k}{2\pi}\int_{-\Lambda/2}^{+\Lambda/2} dx\, e^{-\mathrm{i}\,k\,x}\, f(x)\,. \qquad (9.24)$$

Integral u (9.24) bi morao biti konvergentan da bi mogli postojati Fourierovi koeficijenti, ali se onda taj izraz čini osuđen da nestane u limesu $\Lambda \to \infty$. No sjetimo se da $1/\Lambda = \Delta n/\Lambda = \Delta k/(2\pi)$ u limesu $\Lambda \to \infty$ prelazi u doduše infinitezimalno malene diferencijale $dk/(2\pi)$, ali preko beskonačno mnogo kojih će se integrirati. Naime, budući da k postaje kontinuiran, diskretna suma u (9.23) postaje integral, pa će doprinos biti konačan.

Dakle, (9.24) u limesu $\Lambda \to \infty$ postaje

$$\lim_{\Lambda\to\infty} C_k \;\;\to\;\; \frac{dk}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-\mathrm{i}\,k\,x}\, f(x) \,\equiv\, \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\, b(k)\,, \qquad (9.25)$$

$$b(k) \;\;=\;\; \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-\mathrm{i}\,k\,x}\, f(x)\,. \qquad (9.26)$$

Kažemo da je (9.26) Fourierova transformacija funkcije varijable x u funkciju konjugirane varijable k; naime, u Fourierov transformat $b(k)$.

Taj limes želimo uzeti da bi periodična funkcija $f_\Lambda(x)$ postala aperiodična funkcija $f(x)$, pa (9.23) postaje

$$f(x) = \lim_{\Lambda\to\infty} f_\Lambda(x) = \lim_{\Lambda\to\infty} \left(\sum_{k=-\infty}^{+\infty} C_k \, e^{\mathrm{i}\,k\,x} \right) \;\to\; \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\mathrm{i}\,k\,x}\, b(k)\, dk\,. \tag{9.27}$$

Dakle, umjesto diskretnim Fourierovim redom kompleksnih eksponencijala kojim se izražavaju periodične funkcije, aperiodičnu funkciju koordinate izražavamo kao superpoziciju kontinuiranog skupa kompleksnih eksponencijala, gdje amplitudna funkcija $b(k)$ kaže kolika je zastupljenost pojedine monokromatske harmoničke komponente $\exp(\mathrm{i}\,k\,x)$:

$$f(x) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk\; e^{\mathrm{i}\,k\,x}\, b(k)\,. \tag{9.28}$$

Kažemo da je (9.28) Fourierova transformacija funkcije varijable k u funkciju konjugirane varijable x.

Fourierove transformacije (9.28) i (9.26) su jedna drugoj inverzne. Funkcije $f(x)$ i $b(k)$ su si međusobno Fourierovi transformati; to jest, jedna je Fourierov transformat druge.

9.1.6 Integralne reprezentacije Diracove delta-funkcije

Za bilo koje funkcije komplementarnih varijabli x i k, ako izraz za $b(k)$, tj. Fourierov transformat (9.26), uvrstimo u (njemu) inverznu Fourierovu transformaciju (9.28),

$$f(x) \;=\; \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')}\, dk \right) f(x')\, dx'\,. \tag{9.29}$$

Ako razvoji u kompleksne eksponencijale (9.28) odnosno (9.26) zaista uspijevaju dati točne zapise proizvoljne funkcije $f(x)$ odnosno njenog transformata $b(k)$, onda primjenom inverzne Fourierove transformacije (9.28) na Fourierovu transformaciju (9.26) moramo dobiti identitet. To znači da desna strana relacije (9.29) mora dati $f(x)$ ako Fourierovi integrali rade ispravno.

Po definiciji Diracove δ-funkcije (vidi matematički Dodatak B), za bilo koju funkciju jedne varijable vrijedi

$$f(x) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x')\, f(x')\, dx' \,, \tag{9.30}$$

pa zbog (9.29) mora vrijediti integralna reprezentacija Diracove δ-funkcije, naime prva jednakost u relaciji

$$\delta(x-x') \;=\; \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\,k\,(x-x')}\, dk \;\equiv\; \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_k(x')^*\, \varphi_k(x)\, dk \,. \tag{9.31}$$

Jednakost u gornjoj relaciji dokazujemo u matematičkom Dodatku B, *Osnovno o Diracovoj delta funkciji*, u podsekciji B.2. Znak ekvivalencije u relaciji (9.31) je zapravo definicija normalizacije onih ravnih valova $\varphi_k(x)$ koji žive na cijelom brojevnom pravcu od $-\infty$ do ∞, tj. na intervalu beskonačne duljine ($\Lambda \to \infty$), pa $\varphi_k(x) = \exp(ikx)/\sqrt{2\pi}$ (9.34).

Naime, odmah vidimo da u granici $\Lambda \to \infty$ svojstvene funkcije impulsa $\varphi_k(x)$ ostaju ortonormirane slično relaciji (9.22), samo što konstanta normiranja umjesto $1/\sqrt{\Lambda}$ postaje $1/\sqrt{2\pi}$, a umjesto diskretnog Kroneckerovog simbola $\delta_{kk'}$ dobivamo njegov kontinuirani analogon, naime Diracovu delta-funkciju $\delta(k-k')$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \varphi_{k'}(x)^*\, \varphi_k(x) \;\equiv\; \langle \varphi_{k'}(x) | \varphi_k(x) \rangle \;=\; \delta(k-k') \,. \tag{9.32}$$

Zbog simetrične formulacije Fourierove transformacije i njoj inverzne transformacije, lako vidimo da ako idemo obratno od izvoda (9.31), tj. ako izraz (9.28) za $f(x)$ uvrstimo u njoj inverznu transformaciju (9.26), dobivamo istu integralnu reprezentaciju (9.31), samo sa zamijenjenim simbolima $x \leftrightarrow k$:

$$\delta(k-k') \;=\; \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x}\, dx \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{e^{ik'x}}{\sqrt{2\pi}} \right)^* \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}\, dx \,. \tag{9.33}$$

Od takvog normiranja na Diracovu delta funkciju potječe konstanta normiranja $A = A_1$ ravnog vala $\varphi_k(x)$ u jednoj dimenziji na beskonačnom intervalu, od $-\infty$ do $+\infty$,

$$\varphi_k(x) = A_1\, e^{i\,k\,x} \,, \qquad A_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \,. \tag{9.34}$$

To uspoređujemo s normiranjem $(1/\sqrt{\Lambda})$ ravnih valova (9.21) koji žive na intervalu konačne duljine Λ, što smo imali malo prije u podsekciji 9.1.4.

To je ujedno i faktor normiranja *putujućeg* ravnog vala $\psi_k(x,t)$ (8.3) u jednoj dimenziji,

$$\psi_k(x,t) = A_1\ e^{ikx-i\omega t} = A_1\ \cos(kx-\omega t) + i\,A_1\ \sin(kx-\omega t)\,. \qquad (9.35)$$

Kao matematička definicija integralne reprezentacije Diracove δ-funkcije, formule (9.33) i (9.31) su naravno ekvivalentne jer se razlikuju samo po oznakama varijabli. Međutim, u odnosu na skup ravnih valova $\{\varphi_k(x)\}$, (9.33) je relacija ortogonalnosti tih funkcija, a relacija (9.31) ima značenje njihove *relacije potpunosti*. Naime, prisjetimo se da relacija (9.31) odražava to, da proizvoljnu funkciju f možemo potpuno točno dati razvojem (9.28) u funkcije $\exp(ikx)/\sqrt{2\pi} \equiv \varphi_k(x)$ preko $k \in [-\infty,+\infty]$, isto kao što bilo koji vektor možemo potpuno točno razviti po baznim vektorima *ako* oni čine *potpunu bazu*. Dakle, relacija (9.31) znači da ravni valovi φ_k ($k \in [-\infty,+\infty]$) čine potpunu bazu za *funkcijske* vektore f koji žive na domeni $x \in [-\infty,+\infty]$, tj. na jednodimenzionalnom brojevnom pravcu.

Za sada ćemo se radi tehničke jednostavnosti držati jedne prostorne dimenzije, a generalizacija na tri prostorne dimenzije ($x \to \boldsymbol{r}$) je barem konceptualno (pojmovno) laka.

9.2 Disperzijske relacije za razne kvantone

U kvantnom slučaju, kada su frekvencija ω i valni broj k povezani relacijama (7.1) s energijom $E = \hbar\omega$ odnosno s impulsom $p = \hbar k$, ravni val (9.35) pišemo kao (zadnju) eksponencijalu u (8.3):

$$\psi_k(x,t)\ =\ \varphi_k(x)\,e^{-i\,\omega\,t}\ =\ A_1\ e^{\frac{i}{\hbar}\,p\,x\,-\,\frac{i}{\hbar}\,E\,t}\,, \qquad (9.36)$$

i to je **ravni val kvantnomehaničke amplitude vjerojatnosti**. (Podsjećamo da su kvantni valovi samo jedan specijalni fizikalni slučaj. On je nama ovdje naravno daleko najrelevantniji, ali Planck-Einstein-de Broglieve relacije (7.1) ne važe za sve valove, dok matematičke općenitosti, od kojih ćemo neke sada iznijeti, vrijede za sve.)

U svakoj točki x, ravni val (9.35) oscilira periodom $\tau = 2\pi/\omega$ između amplitudâ $\pm A_1$. Isto tako, valni broj k daje periodičnost u prostoru, jer za svaki čas t, ravni val (9.35) se u prostoru talasa valnom duljinom $\lambda = 2\pi/k$ između amplitudâ $\pm A_1$:

$$\psi_k(0,t) = A_1\, e^{-i\omega(|k|)t} \quad \text{odnosno} \quad \psi_k(x,0) \equiv \varphi_k(x) = A_1\, e^{ikx}\,. \tag{9.37}$$

Tu smo u prvoj jednadžbi s $\omega(|k|)$ eksplicitno naznačili da ω ovisi samo o iznosu $|k|$ (tj. o valnoj duljini λ), ali *ne* i o smjeru (predznaku) k. Tako mora biti ako je prostor izotropan. Veza $\omega = \omega(k)$ između frekvencije ω i valnog broja k naziva se *disperzijska relacija*. Vidjet ćemo da ona bitno određuje kako se valovi tokom vremena šire prostorom, tj. *propagiraju*.

Za kvantne čestice vrijede Planck-Einstein-de Broglieve relacije (7.1), zbog čega su relacije koje povezuju njihovu energiju i impuls ekvivalentne (do na $\hbar$) s disperzijskim relacijama njihovih valova. Primjerice, za relativističke masivne čestice je to (8.59), odnosno ekvivalentna disperzijska relacija

$$E^2 \,=\, p^2\,c^2 \,+\, (m\,c^2)^2 \quad\Longleftrightarrow\quad \omega(k)^2 \,=\, c^2\,k^2 \,+\, \left(\frac{m\,c^2}{\hbar}\right)^2\,. \tag{9.38}$$

Bezmaseni limes toga, koji obuhvaća i fotone kao najvažniji primjer, daje istu disperzijsku relaciju kao kod elektromagnetskih valova u vakuumu:

$$E^2 \,=\, (p\,c)^2 \quad\Longleftrightarrow\quad \omega(k)^2 \,=\, (c\,k)^2 \quad\Longleftrightarrow\quad \omega(k) \,=\, c\,|k|\,. \tag{9.39}$$

No nama je daleko najvažniji slučaj masivnih ali *nerelativističkih* kvantona, gdje energija slobodne čestice i ekvivalentna disperzijska relacija glase

$$E \,=\, T \,=\, \frac{p^2}{2m} \,=\, \frac{\hbar^2\,k^2}{2m} \quad\Longleftrightarrow\quad \omega(k) \,=\, \frac{\hbar\,k^2}{2m}\,. \tag{9.40}$$

9.3 Putujući i stojni valovi

Putujući val općenitog oblika koji se duž osi x prema $+\infty$ giba konstantnom brzinom v dat je *proizvoljnom* funkcijom $f_+(x-vt)$. To je tako zbog posebnog oblika $(x - vt)$ ovisnosti o dvije nezavisne varijable x i t, što je ilustrirano na Slici 9.3. Naime, vrijednost funkcije $f_+(x - vt)$ je konstantna za fiksnu,

konstantnu vrijednost njenog argumenta $\zeta_{+v}(x,t) = x - vt = konst$, kada njegova derivacija iščezava:

$$\frac{d\zeta_{+v}(x,t)}{dt} = \frac{dx}{dt} - v = 0\,. \tag{9.41}$$

Brzina kojom se koordinata $x(t)$ mijenja je dx/dt. (9.41) pokazuje da se koordinata x svake date vrijednosti funkcije $f_+(x - vt)$ povećava brzinom iznosa v, tj. $\Delta x = v\Delta t$. Tako se cijeli valni oblik f_+ nepromijenjen translatira brzinom v u pravcu $+\infty$. Iz istog razloga je proizvoljna funkcija $f_-(x + vt)$ val općenitog oblika koji se brzinom iznosa v kao cjelina giba prema $-\infty$. [Osim posebnog oblika prostorno-vremenske ovisnosti njihovih argumenata $\zeta_{\pm v}(x,t) = x \mp vt$, funkcije $f_\pm(\zeta_{\pm v}) = f_\pm(x \mp vt)$ su proizvoljne sve dok na njih ne nametnemo neke posebne uvjete/zahtjeve.]

Međutim, pitanje je u kojim slučajevima je moguće takvo gibanje vala *općenitog* oblika f, ilustrirano na Slici 9.3. Odnosno, kada je zaista realizirano da se oblik vala f samo translatira bez promjene. Tim pitanjem ćemo se još mnogo baviti, ali u idućem poglavlju o vremenskoj ovisnosti superpozicijâ ravnih valova raznih frekvencija, tzv. valnih paketa.

No, takvo valno gibanje zaista imamo u *specijalnom* slučaju *pojedinačnih* ravnih valova (monokromatskih harmoničkih valova), dakle (9.35), te realnih i imaginarnih dijelova toga.

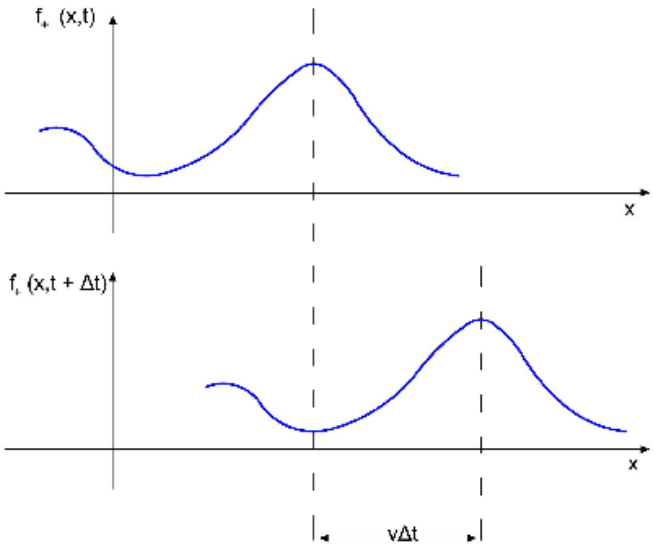
Iako su x i t nezavisne varijable, podsjetimo se da ravni val (9.35) o njima ovisi samo u specijalnoj kombinaciji (8.5). Zbog toga on također spada među putujuće valove $f_\pm$. Štoviše, rekli smo da je on njihov najjednostavniji predstavnik. Naime, do na konstantu normiranja A_1, ravni je val (9.35) dat fazom ϕ_k (8.2), koju možemo pisati i u oblicima koji ističu njenu brzinu:

$$\phi_k(x,t) = k\,x - \omega\,t = k\,(\,x - \frac{\omega}{k}\,t\,) = \pm|k|\,(\,x \mp v(k)\,t\,) \;\equiv\; \pm|k|\,\zeta_{\pm v}(x,t)\;. \tag{9.42}$$

Vrijednost funkcije $\psi_k(x,t)$ (9.35) je fiksna, konstantna, za vrijednosti x, t na kojima je faza $\phi_k = kx - \omega t$ neka određena **konstanta**. Tada joj derivacija iščezava,

$$\frac{d\phi_k}{dt} = k\,\frac{dx}{dt} - \omega = 0\,. \tag{9.43}$$

Odakle slijedi [u punoj analogiji s relacijom (9.41)] da se točke konstantne



Slika 9.3: Naprijed putujući val $f_+(x-vt)$ općenitog profila.

faze gibaju (propagiraju) brzinom iznosa $v_f \equiv \omega/|k|$, koja se iz očitih razloga naziva *faznom brzinom*.

Ravni se val giba brzinom iznosa $v = v_f = \omega/|k|$ prema $+\infty$ ili prema $-\infty$ ovisno o predznaku valnog broja $k = \pm|k|$:

$$e^{\pm i|k|x - i\omega t} = e^{\pm i|k|\,[\,x \mp v_f t\,]} = \cos(\pm|k|\,[\,x \mp v_f t\,]) + i\,\sin(\pm|k|\,[\,x \mp v_f t\,])\,. \tag{9.44}$$

Zato je ravni val pogodan za razvoj funkcija oblika putujućih valova,

$$f_+(x-vt) \quad \text{odnosno} \quad f_-(x+vt)\,, \tag{9.45}$$

u Fourierov red odnosno Fourierov integral.

Međutim, takvim razvojem, odnosno linearnom superpozicijom takvih putujućih ravnih valova suprotnih brzina, možemo prikazati i **stojne valove**. Najjednostavniji primjer (u matematičkom smislu, Fourierov red (9.15) sa samo dva člana) je zbroj dva ravna vala s valnim brojevima istih iznosa ali *suprotnih predznaka*. To daje stojni val, jer zbog simetrije izotropnosti

prostora, $\omega = \omega(|k|)$ može ovisiti samo o iznosu valnog broja k, ali ne i o predznaku (to jest, smjeru):

$$C_k\, e^{ikx-i\omega t} + C_{-k}\, e^{-ikx-i\omega t} \;=\; (\, C_k\, e^{ikx} + C_{-k}\, e^{-ikx}\,)\, e^{-i\omega t}\,. \tag{9.46}$$

Taj je val u prostoru periodičan s valnom duljinom $\lambda = 2\pi/|k|$ i stojni je, jer se očito ne giba duž osi x, tj. *ne propagira* se u prostoru, nego na istom mjestu oscilira s periodom $\tau = 2\pi/\omega$.

To možemo lako vizualizirati, na primjer, odabirom $C_k = C_{-k} = 1$ u (9.46):

$$e^{ikx-i\omega t} + e^{-ikx-i\omega t} = 2\,\cos(kx)\, e^{-i\omega t}\,, \tag{9.47}$$

a odabir $C_k = i = -\,C_{-k}$ daje sinusni stojni val $2\sin(kx)\, e^{-i\omega t}$. Ta je funkcija (naravno nakon normiranja na 1), kao i (9.47), **smisleno upotrebljiva kao kvantna amplituda vjerojatnosti** u smislu Bornovog postulata (7.4) **zahvaljujući svojoj vremenskoj ovisnosti**. Ona je naime oblika $e^{-i\omega t}$, što nikad ne iščezava, a $|e^{-i\omega t}|^2 = 1$ ima smisla za stojni val vjerojatnosti.

Nasuprot tome, ako umjesto kompleksnih eksponencijala u (9.47) superponiramo realne harmoničke funkcije (tj. sinuse i kosinuse) istih argumenata (koji osiguravaju putovanje prema $+\infty$ odnosno $-\infty$), odmah ćemo dobiti rezulatate koji su besmisleni za kvantnomehaničke valove, iako su točni za klasične valove. (Iako sin i $\cos(\pm kx - \omega t)$ ne zadovoljavaju nerelativističku Schrödingerovu jednadžbu (8.62), zadovoljavaju relativističku kvantnu Klein-Gordonovu jednadžbu (8.60), pa je vrijedno dodatno ispitati njihovu pogodnost za valove vjerojatnosti.) Na primjer, za stojne valove na beskonačnoj razapetoj žici koja je ravna u početnom času $t = 0$, dobar opis je

$$\sin(kx{-}\omega t){+}\sin(-kx{-}\omega t) = \sin(kx{-}\omega t){-}\sin(kx{+}\omega t) = -2\,\cos(kx)\,\sin(\omega t)\,, \tag{9.48}$$

što iščezava *u cijelom prostoru*, $\forall x$, u trenucima $\omega t = n\pi$, $\forall n \in \mathbb{Z}$. No, to je naravno besmisleno za amplitudu vjerojatnosti nalaženja čestice, da periodično tako nestaje $\forall x$ i ponovo nastaje. Slično, zbroj kosinusa tih argumenata daje $2\cos(kx)\,\cos(\omega t)$ [što je naprosto realni dio jednadžbe (9.47)], pa bi vjerojatnosna interpretacija implicirala da u cijelom prostoru kvantna čestica periodično u vremenu t nestaje kad god je ωt polucjelobrojni umnožak s π. To je naravno također besmisleno, pogotovo za česticu mase mirovanja $m > 0$, koja ima referentni sustav u kojem miruje, pa bi se tamo morala naći.

Dakle, u kvantnoj su mehanici kompleksne funkcije nužne čak i kada kvantna (Klein-Gordonova) jednadžba ima i rješenja oblika jedne realne funkcije.

Mi smo zapravo već susreli stojne valove kod prostorno ograničenih (vezanih) kvantnih sustava. U podsekciji 8.6 o najjednostavnijem vezanom stanju vidjeli smo kako se oni prirodno pojavljuju zbog rubnih uvjeta, analogno "fiksiranju krajeva žice konačne duljine" u klasičnom slučaju, gdje su razlike objašnjene malo prije. Primjere stojnih valova u jednoj dimenziji smo već ilustrirali Slikom 8.1, koja u našem, kvantnom kontekstu prikazuje svojstvene funkcije energije kvantona zarobljenog u pravokutnom potencijalu beskonačne visine.

Stojni valovi vjerojatnosti u kvantnoj fizici opisuju stanja mikro-čestica koje su vezane u nekom ograničenom dijelu prostora pa ga, suprotno putujućim valovima, ne mogu tokom vremena napustiti.

9.4 Fourierovi integrali i valni paketi kvantona

Proizvoljnu neperiodičku funkciju f varijable x možemo prikazati kao Fourierov integral (9.28), pa to naravno možemo primijeniti i na općenitu kvantnu valnu funkciju $\Psi(x,t)$ u nekom *fiksnom* vremenskom času t, recimo $t=0$:

$$f(x) = \Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\, e^{ikx}\, dk = \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\, \psi_k(x,0)\, dk\,. \qquad (9.49)$$

Koliko je pojedina kompleksna eksponencijala, dakle pojedina *monokromatska komponenta* s određenim valnim brojem k zastupljena u toj superpoziciji, tj. u Fourierovom razvoju (9.49) neke konkretne funkcije Ψ u $\exp(ikx)$, to kaže amplitudna funkcija $b(k)$. To se vidi već kod (9.28), koja je u općem matematičkom smislu pokazala da je $f(x)$ *Fourierov transformat* funkcije $b(k)$, koja je pak data *inverznom* (u odnosu na (9.28)) *Fourierovom transformacijom* (9.26), pa je i ona Fourierov transformat – naravno, funkcije $f(x)$.

9.4.1 Valne funkcije u impulsnom prostoru

No *u kontekstu kvantne fizike*, $k = p/\hbar$. Zato su ravni valovi $\psi_k(x,0) = \varphi_k(x) = \exp(ipx/\hbar)/\sqrt{2\pi}$ u koje je razvijena funkcija $\Psi(x,0)$ (9.49), upravo svojstvene funkcije operatora impulsa (8.12) sa svojstvenom vrijednošću p. U smislu podsekcijâ 7.3.3 i 7.3.4, $b(k)$ je skalarni produkt $\varphi_k(x)$ i $\Psi(x,0)$, tj. *projekcija* vektora kvantnog stanja Ψ na svojstveni vektor impulsa φ_k:

$$b(k) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0)\, e^{-ikx}\, dx \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_k(x)^*\, \Psi(x,0)\, dx \tag{9.50}$$

$$= \langle\, \varphi_k(x) \,|\, \Psi(x,0) \,\rangle\,. \tag{9.51}$$

Znači, *u kvantnom kontekstu*, $b(k)$ je amplituda vjerojatnosti za nalaženje da kvantna čestica ima valni broj k, odnosno impuls $p = \hbar k$, tj. valna funkcija u prostoru valnog broja, odnosno valna funkcija u *impulsnom prostoru*. Drugim riječima, $b(k)$ je **impulsna reprezentacija kvantnog stanja** – isto kao što je valna funkcija položaja $\Psi(x,0)$ amplituda vjerojatnosti za nalaženje čestice u položajnoj koordinati x (u času $t = 0$), ili drugim riječima **položajna reprezentacija kvantnog stanja**.

Dakle, matematička simetrija između Fourierove transformacije i inverzne Fourierove transformacije ima svoj odraz u simetričnim fizikalnim načinima kojima možemo opisati stanje kvantne čestice – valnom funkcijom položaja **ili** valnom funkcijom impulsa.

Zato se u tekstovima o kvantnoj teoriji često prelazi na notaciju koja tu simetriju još eksplicitnije izražava, poput

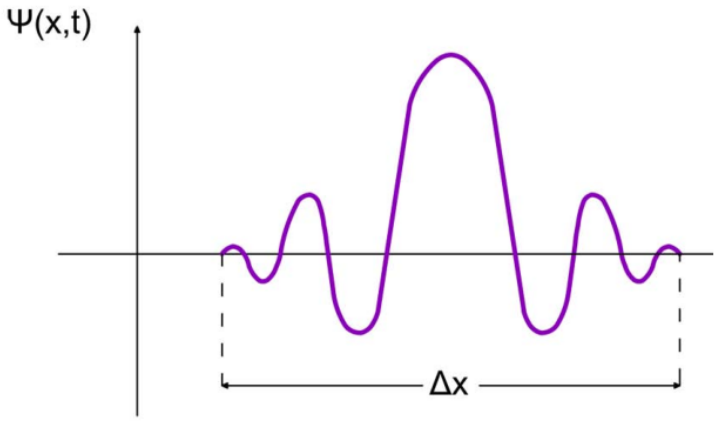
$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \widetilde{\Psi}(p)\, e^{ipx/\hbar} \tag{9.52}$$

$$\widetilde{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi(x)\, e^{-ipx/\hbar}\,, \tag{9.53}$$

gdje, uz naravno trivijalnu identifikaciju $\Psi(x) \equiv \Psi(x,0)$ i $dk = dp/\hbar$, trebamo i reskaliranje s $\sqrt{\hbar}$

$$b(k) \;=\; b(p/\hbar) \;\equiv\; \sqrt{\hbar}\, \widetilde{\Psi}(p) \tag{9.54}$$

da uspostavimo točnu vezu s ovdašnjom notacijom. (Nje se držimo i dalje, a (9.53) ovdje služi samo kao informacija o drugim notacijama u literaturi.)



Slika 9.4: Valni paket protegnuća Δx u 1-dimenzionalom prostoru, kao primjer (realnog dijela) funkcije Ψ lokalizirane unutar neke ograničene prostorne domene. Što je Δx manji, Fourierov transformat funkcije Ψ ima veći Δk.

Za neke konkretne i važne primjere funkcijâ $f(x)$ i $b(k)$, te njihovih veza kroz relacije (9.49) i (9.50), proučite Zadatke 9.7 i 9.8.

Ti primjeri ilustriraju da je forma (9.49), kao i njeno trodimenzionalno poopćenje (10.42), pogodna za predstavljanje funkcija koje nazivamo **valnim paketima**. To su tipično valne funkcije Ψ lokalizirane unutar neke ograničene prostorne domene, recimo duljine Δx u jednodimenzionalom slučaju, kao na Slici 9.4, odnosno površine ΔS u dvodimenzionalnom, ili volumena ΔV u trodimenzionalom slučaju. Zato su pogodne za opis mikro-objekata koji na skalama mnogo većim od Δx, ΔS, odnosno ΔV izgledaju kao jako lokalizirane, naizgled točkaste čestice, tj. "materijalne točke" klasične mehanike.

Takvi se valni paketi mogu dobiti samo superpozicijom više ravnih valova raznih valnih brojeva k. Funkcija $\Psi(x)$ prikazana na slici 9.4, koja ima protegnuće Δx u koordinatnom prostoru, mora u Fourierovoj reprezentaciji (9.49) imati amplitudnu funkciju $b(k)$ koja ima maksimum oko nekog srednjeg valnog broja k_0, ali je značajno različita od 0 i u nekom intervalu Δk

oko $k = k_0$.

Fourierovom se analizom može matematički pokazati da takav valni paket lokaliziran unutar duljine Δx ima raspon valnih brojeva Δk takav da vrijedi

$$\Delta x \, \Delta k \geq \frac{1}{2} \, . \tag{9.55}$$

Prema tome, što je funkcija $f(x)$ lokaliziranija u koordinatnom, x-prostoru, to jest što manji Δx ona ima, njezin Fourierov transformat $b(k)$ ima veći $\Delta k \geq 1/(2\Delta x)$; dakle, delokaliziraniji je u prostoru valnog broja k. Naravno, relacija (9.55) implicira i obratno: što je $b(k)$ lokaliziraniji u k-prostoru, to je delokaliziranija njena inverzna transformacija u koordinatni (položajni) prostor, jer $\Delta x \geq 1/(2\Delta k)$.

Matematika je neovisna od fizikalnih, tehničkih i ostalih primjenâ, pa rezultat (9.55) vrijedi za bilo koji par konjugiranih varijabli u Fourierovoj analizi. Dakle, i kod funkcijâ vremena t, kojemu je konjugirana varijabla - frekvencija ω, pa vrijedi i

$$\Delta t \, \Delta \omega \geq \frac{1}{2} \, . \tag{9.56}$$

9.4.2 Heisenbergove relacije neodređenosti iz Fourierove analize

Heisenbergove relacije neodređenosti, ugrubo (6.38)-(6.39), osim iz kvalitativnih razmatranja poput "Heisenbergovog mikroskopa", mogu se dobiti i na druge, preciznije načine – na primjer, kao nusprodukt rezultatâ (9.55) i (9.56) Fourierove analize.

Budući da za *kvantne* valove vjerojatnosti vrijedi de Broglijeva relacija $p = \hbar k$ između valnih brojeva i impulsa mikro-objekta kojeg val opisuje, k-prostor je za njih zapravo isto što i impulsni, p-prostor, a relacija (9.55) isto što i Heisenbergova relacija neodređenosti (**HRN**), točnija od (6.38):

$$\Delta x \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \, . \tag{9.57}$$

Eksperimentalni rezultati su u skladu s **HRN**. Na primjer, ako je kvantno stanje opisano valnom funkcijom položaja x koja ima prostorno protegnuće Δx, mjerenjâ impulsa daju vrijednosti p u intervalu širine $\Delta p \geq \hbar/(2\Delta x)$.

Dakle vidimo da je pojam valova vjerojatnosti u skladu s **HRN**. Štoviše, možemo zaključiti da Heisenbergov princip neodređenosti u kvantnoj fizici potječe od valnog svojstva kvantonâ općenito. Dakle, ne samo kod fotonâ, koji su u svakom slučaju povezani s ranije prihvaćenim elektromagnetskim valovima, nego i kod masivnih kvantnih česticâ, kojima je valno svojstvo pripisano tek kroz hipotezu de Broglieovih valova, koje je Born konzistentno interpretirao kao valove vjerojatnosti. Pritom valna funkcija položajnih koordinata ima značenje amplitude vjerojatnosti da je kvanton na nekom položaju u koordinatnom prostoru, no isto su tako amplitude $b(k)$ valne funkcije u prostoru valnog broja, odnosno u *impulsnom prostoru*. To jest, $b(k)$ je amplituda vjerojatnosti, a $|b(k)|^2$ gustoća vjerojatnosti da se neki kvanton nađe s valnim brojem k, odnosno s impulsom $p = \hbar k$.

Za vježbu pokažite da **HRN** (9.57) implicira stabilnost osnovnog stanja atoma. (Uputa: to se vidi na vrlo sličan način kao što smo to pokazali iz de Broglieve valne duljine u Poglavlju 6. Alternativno, pogledajte riješeni primjer 7.4 u Eisbergu i Resnicku [31].)

Planckova pak relacija $E = \hbar\omega$ prevodi (9.56) u Heisenbergove relacije neodređenosti za energiju i vrijeme,

$$\Delta t\, \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}\,. \tag{9.58}$$

Ponovimo da su nejednakost (9.55) i (9.56), pa stoga i njihove "kvantne posljedice" (9.57) i (9.58), fizikalne manifestacije istog *općenitog matematičkog rezultata* za bilo kakve funkcije, pa i valne funkcije *bilo koje* fizikalne prirode. Međutim, taj matematički paralelizam *ne* znači da je fizikalno tumačenje implikacijâ relacijâ (9.57) i (9.58) potpuno analogno, jer se primjenjuje na konkretne fizikalne veličine, a njihova uloga može biti prilično različita u raznim fizikalnim situacijama. Zaista, pažljivim razmatranjem kvantne teorije može se vidjeti da je vrijeme t tu univerzalni, svemu zajednički parametar koji igra prilično drugačiju ulogu od položajnih koordinatâ x, y i z koje svakom kvantnom sistemu pridružujemo (i možemo mu ih mjeriti) posebno.

Jednostavna primjena na svojstvena stanja energije i impulsa će nam pružiti konkretnu ilustraciju. Svojstveno stanje linearnog impulsa ima točno određen impuls. Na primjer, $\varphi_k(x)$ ima točno određen $p = \hbar k$, ili preciznije rečeno, točno određen $p_x = \hbar k_x$ (samo što se nismo trudili pisati subskript za komponentu), pa je $\Delta p_x = 0$. Zbog $\hbar \neq 0$, **HRN** (9.57) implicira da je

neodređenost položaja $\Delta x = \infty$. I zaista, u kvantnom stanju $\varphi_k(x)$, gustoća vjerojatnosti nalaženja $|\varphi_k(x)|^2 = konstanta$ u svakoj točki x od $-\infty$ do $+\infty$, pa je položaj potpuno neodređen. Naravno, u realnosti niti se svemir proteže od $-\infty$ do $+\infty$ nego je konačan, niti kvantoni imaju vremena prijeći niti mali dio svemira, pa je rečeno idealizacija, strogo govoreći. Međutim, na kvantnim skalama je zbog njihove malenosti opravdano gornji opis smatrati potpuno točnim. (Ostaje doduše tehničko pitanje koliko čisto monokromatski val $\varphi_k(x)$ smo sposobni načiniti.)

Isto tako, svojstvena stanja energije (8.35)-(8.36) imaju točno određenu energiju E, što opet znači da je i tu neodređenost $\Delta E = 0$. Zbog $\hbar \neq 0$, E-t **HRN** (9.58) implicira da je neodređenost vremena $\Delta t = \infty$. Interpretacija toga bi bila da takva stanja mogu postojati vječno – naravno, ako ih se ne dira, "perturbira". To perturbiranje, "remećenje" ili "smetanje" je međutim nemoguće potpuno ukloniti čak i kod najizaštićenijih sustava zbog fluktuirajućih interakcijâ s okolinom, a gravitacijski i s ostatkom svemira. Te fluktuirajuće interakcije nije moguće uključiti u Hamiltonijan (8.32) vremenski neovisne Schrödigerove jednadžbe, pa je u tom smislu ona samo aproksimativna. Zato su samo osnovna stanja kvantnih sustava potpuno stabilna, a pobuđena stanja mogu biti samo približno stabilna. U realnosti, pobuđena stanja imaju energijske razine koje ipak imaju neku neodređenost $\Delta E \neq 0$ (vidi na primjer "prirodnu širinu spektralne linije" kod atoma i sličnih kvantnih sustavâ). No zato imaju i $\Delta t < \infty$ – znači, konačno "vrijeme života".

9.5 Zadaci 9

9.1) Pokaži da je **svaku funkciju** f moguće zapisati kao zbroj $f = f_+ + f_-$ parnog dijela f_+ i neparnog dijela f_-.

RJEŠENJE:
Eksplicite pišemo parni i neparni dio tog zapisa za bilo koju funkciju f:

$$f_+(x) = \frac{f(x) + f(-x)}{2} = f_+(-x)\,, \quad f_-(x) = \frac{f(x) - f(-x)}{2} = -f_-(-x)\,. \tag{9.59}$$

9.2) Pokaži da za funkciju razvijenu u Fourierov red kompleksnih eksponen-

cijalâ (9.15) vrijedi Bessel-Parsevalova relacija ako je ta funkcija kvadratno integrabilna na intervalu periodičnosti Λ.

Rješenje: Dignimo obje strane jednadžbe (9.15) na apsolutni kvadrat, te ih integrirajmo preko intervala periodičnosti Λ. Imajući na umu bijekciju (9.13) između n i (još uvijek diskretnog) k, iskoristimo relaciju (9.19). Ona daje $\delta_{kk'}\,\Lambda$ na desnoj strani, gdje "ubija" jednu od sumâ, tako da slijedi Bessel-Parsevalova relacija:

$$\frac{1}{\Lambda}\int_d^{\Lambda+d} dx\,|f(x)|^2 \;=\; \sum_{k=-\infty}^{+\infty} |C_k|^2\,. \tag{9.60}$$

(Bessel-Parsevalova jednakost (9.60) slijedi za kvadratno integrabilne funkcije kao donja granica Besselove nejednakosti.)

9.3) Ako Fourierov razvoj (9.15) vrijedi i za neku drugu funkciju $g(x)$, naravno s drugačijim koeficijentima D_k, pokažite (u biti na isti način kao u prethodnom zadatku) da se Bessel-Parsevalova relacija (9.60) poopćava na

$$\frac{1}{\Lambda}\int_d^{\Lambda+d} dx\,g(x)^*\,f(x) \;=\; \sum_{k=-\infty}^{+\infty} D_k^*\,C_k\,. \tag{9.61}$$

9.4) Pokaži da za funkciju razvijenu u Fourierov red kosinusâ i sinusâ (9.5) s koeficijentima a_n i b_n, Bessel-Parsevalova relacija (9.60) postaje

$$\frac{1}{\Lambda}\int_d^{\Lambda+d} dx\,|f(x)|^2 \;=\; |a_0|^2 + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{\infty}\left[\,|a_n|^2 + |b_n|^2\,\right]\,. \tag{9.62}$$

9.5) Dokažite Parseval-Plancherelov teorem odnosno identitet (9.64), koji pokazuje da Fourierova transformacija čuva normu.

Rješenje: U izrazu za kvadrat norme $||f||^2 \equiv \langle f|f\rangle$ (7.21), primijenimo Fourierovu transformaciju (9.28) na funkcije f i f^* u koordinatnom prostoru:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|f(x)|^2 \;=\; \int_{-\infty}^{+\infty} dk\,b(k)\int_{-\infty}^{+\infty} dk'\,b^*(k')\,\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x}\,dx\,. \tag{9.63}$$

Integral po koordinati x daje Diracovu delta-funkciju valnog broja $\delta(k-k')$ (9.33) koja ostavlja samo $k = k'$, tj. ubija jednu od integracija po valnim

brojevima. Zato (9.63) daje Parseval-Plancherelov identitet:

$$||f||^2 \,=\, \langle f|f\rangle \,=\, \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |f(x)|^2 \,=\, \int_{-\infty}^{\infty} dk\, |b(k)|^2 \,=\, \langle b|b\rangle \,=\, ||b||^2\,. \quad (9.64)$$

9.6) Na isti način kao u prethodnom zadatku, dokažite da Fourierova transformacija čuva skalarni produkt funkcijâ; to jest, izvedite poopćenje (9.65) Parseval-Plancherelovog identiteta:

$$\langle g|f\rangle \,=\, \int_{-\infty}^{\infty} dx\, g^*(x)\, f(x) \,=\, \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \widetilde{g}^*(k)\, \widetilde{f}(k) \,=\, \langle \widetilde{g}|\widetilde{f}\rangle\,, \qquad (9.65)$$

gdje $\sim$ nad funkcijama simbolizira Fourierove transformate, $b(k) = \widetilde{f}(k)$.

9.7) Nađi Fourierov transformat inicijalno kvadratičnog vala, tj. valnog paketa koji je u času $t = 0$ dan sa $\Psi(x,0) = 1/\sqrt{L}$ ako $|x| \leq L/2$, te $\Psi(x,0) = 0$ ako $|x| > L/2$. Zatim učini isto za $\Psi(x,0) = e^{ik_0 x}/\sqrt{L}$ ako $|x| \leq L/2$, te $\Psi(x,0) = 0$ ako $|x| > L/2$.

9.8) Nađi Fourierov transformat ravnog vala $\varphi_k(x)$.

9.9) Nađi Fourierov transformat Diracove delta-funkcije, i to:

a) $\delta(k - k')$, b) $\delta(x - x')$.

9.10) Nađi Fourierov transformat valnog paketa koji je u času $t = 0$ dat Gaussovom funkcijom.

9.11) Kolika je najniža energija, tj. energija osnovnog stanja *klasičnog*, a kolika *kvantnog* harmoničkog oscilatora (HO)? *Procijeni* energiju osnovnog stanja jednodimenzionalnog harmoničkog oscilatora u kvantnoj fizici koristeći Heisenbergovu relaciju neodređenosti u (a) najstarijoj, kvalitativnijoj verziji (6.38), te (b) u točnijoj verziji (9.57).

Rješenja, uz diskusiju i rekapitulaciju o energijama HO:
HO mase m i prirodne/svojstvene frekvencije ν, odnosno $\omega = 2\pi\nu = \sqrt{K/m}$, ima potencijalnu energiju $V_{\rm HO}(x) = (K/2)\, x^2 = (m\omega^2/2)\, x^2$.
Ukupna energija HO je

$$E \,=\, T(p) + V_{\rm HO}(x) \,=\, \frac{p^2}{2m} \,+\, \frac{K}{2}\, x^2\,, \qquad (9.66)$$

pa je *klasična* energija E kontinuirana veličina, data kontinuiranim veličinama x i $p = m\dot{x}$, što se može sažeti u maksimalnu elongaciju $x_{\max}$, vidi (2.19). Zato je najniža moguća energija HO u *klasičnom* osnovnom stanju očito $E = 0$, za **točno određene** vrijednosti $x = 0$ i $p = m\dot{x} = 0$.

No to istovremeno iščezavanje neodređenosti i položaja i impulsa, $\Delta x = 0 = \Delta p$, u kvantnoj je fizici **nemoguće** u bilo kojem stanju, pa i u osnovnom. Naime, Heisenbergove relacije neodređenosti, **HRN** (6.38) ili (9.57), sprečavaju to, jer daju donju granicu produkta tih neodređenosti. Stoga

$$E \sim \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{K}{2}(\Delta x)^2 \;=\; \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{m\,\omega^2}{2}(\Delta x)^2 \tag{9.67}$$

predstavlja dobru početnu procjenu za najnižu energiju HO, jer su neodređenosti Δp i Δx dobre procjene za minimalne vrijednosti p i x koje bismo (umjesto minimalnih klasičnih vrijednosti $p = 0 = x$) uvrstili u (9.66).

$$\textbf{Rješenje (a)}: (6.38) \Rightarrow \Delta x \sim \frac{h}{\Delta p} \Rightarrow E \sim \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{m\,\omega^2}{2}\frac{h^2}{(\Delta p)^2}\,. \tag{9.68}$$

Ako tu procjenu minimiziramo po Δp zahtjevajući $\partial E/\partial(\Delta p) = 0$, dobijemo

$$\frac{\partial E}{\partial(\Delta p)} \;=\; \frac{\Delta p}{m} - \frac{m\,\omega^2\,h^2}{(\Delta p)^3} = 0 \quad \Rightarrow \quad (\Delta p)^2 = m\,h\,\omega\,. \tag{9.69}$$

Time procjena najmanje moguće energije (9.67) HO-a postaje
$E \sim \frac{1}{2}\,h\,\omega \,+ \frac{1}{2}\,h\,\omega = h\,\omega$.
To je za faktor 4π veće od egzaktnog rezultata $E_0 = \frac{1}{2}\,\hbar\omega$, što je osnovna, $n = 0$ energija u spektru (2.48) [ponovljen kao (9.72) ovdje]. Faktor 4π znači razliku od reda veličine, ali kvalitativno je važno da i najgrublja verzija pokazuje da **HRN** nužno dovodi do konačnih energijâ, tj. do nemogućnosti apsolutnog mirovanja čak ni u kvantnim stanjima najniže energije.

Rješenje (b): Ako pak u početnoj procjeni (9.67) upotrijebimo točniju verziju **HRN** (9.57), $\Delta x\,\Delta \geq \frac{1}{2}\,\hbar$, mijenjamo samo $h \to \frac{1}{2}\,\hbar$ i $E \sim \to\; E \gtrsim$:

$$E \gtrsim \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{m\,\omega^2}{2}\frac{(\frac{1}{2}\,\hbar)^2}{(\Delta p)^2} \quad \text{pa} \quad \frac{\partial E}{\partial(\Delta p)} = 0 \quad \text{daje} \quad (\Delta p)^2 = m\,\frac{\hbar\omega}{2}\,. \tag{9.70}$$

Tada procjena najmanje moguće energije (9.67) HO-a postaje

$$E \gtrsim \frac{1}{2}\,\frac{\hbar\omega}{2} \;+\; \frac{1}{2}\,\frac{\hbar\omega}{2} \;=\; \frac{\hbar\omega}{2}\,. \tag{9.71}$$

Dakle, boljim relacijama neodređenosti (9.57) je procjena za minimalnu energiju (9.71) dovedena u polukvantitativno slaganje s egzaktnim rezultatom za energiju osnovnog stanja HO, $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$, tj. $n = 0$ u (2.48), odnosno (9.72).

Podsjetimo se i raspravimo: Što možemo znati a što trenutno znamo o energijama *kvantnog* HO? Standardan postupak za njihovo dobivanje je prema prethodnom poglavlju taj, da operatorskom zamjenom (8.12) od energije (9.66) načinimo operator Hamiltonijana harmoničkog oscilatora. Potom bismo odgovarajući spektar svojstvenih energijâ E_n (9.72), te njihovih svojstvenih funkcijâ φ_{E_n}, dobili rješavanjem **vNSj**, tj. vremenski neovisne Schrödingerove jednadžbe (8.32) odnosno (8.34). Ona bi za HO sadržavala potencijalnu energiju $V_{\rm HO}(x) \propto x^2$. Ali, ovdje se želimo ograničiti samo na najjednostavnije potencijale $V = konstanta$, za koje se **vNSj** svodi na harmonički oblik poput (8.29) ili pak (8.40) – dakle, na slobodnu kvantnu česticu ili pak na onu vezanu u beskonačnom pravokutnom potencijalu. Zato ovdje nećemo rješavati **vNSj** s $V_{\rm HO}(x)$, što bi dalo (9.72).

Međutim, podsjetimo se da smo te dozvoljene energije E_n za HO već dobili na drugi način, u Poglavlju 2. Iz Planckove kvantne hipoteze za objašnjenje zračenja crnog tijela i za to potrebnih prosječnih energijâ, u riješenom Zadatku 2.6 dobili smo rezultat (2.48) za E_n uključujući $E_0 \neq 0$, naime:

$$E_n \,=\, h\nu \left(n + \frac{1}{2}\right) \,=\, \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \,, \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \,. \tag{9.72}$$

Znači, energije HO čine beskonačno visoku i ekvidistantnu ljestvicu. Ona počinje od konačne vrijednosti najniže energije, tj. energije osnovnog stanja. Tu $n = 0$, pa $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega > 0$, za razliku od najniže energije klasičnog HO.

Konačna vrijednost energijâ na osnovnoj energetskoj razini, značajna je osobitost kvantne mehanike. $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ se ponekad naziva *energijom nultog gibanja* ili *energijom kvantnih fluktuacija* – ili pak *energijom vakuuma*, jer doprinosi i onda kada klasično nema ničega. Naime, mod titranja svakog polja (na pr. elektromagnetskog) na frekvenciji ω ekvivalentan je harmoničkom oscilatoru, pa doprinosi energiju $E_0(\omega) = \frac{1}{2}\hbar\omega$ na svakoj frekvenciji ω čak i kad polje uopće nije pobuđeno - vidi izlaganje između formulâ (2.32) i (2.33).

Poglavlje 10

Vremenski razvoj valnih paketa - slobodnih kvantona

U prošlom smo poglavlju pokazali kako proizvoljnu valnu funkciju $\Psi(x,0)$ u fiksnom času $t=0$ možemo zapisati pomoću Fourierove transformacije (9.49). U ovom ćemo poglavlju razmatrati njihov vremenski razvoj do proizvoljnog vremena t, jer nas zanima ne samo amplituda vala u jednom času (na pr. $t=0$), što je $\Psi(x,0)$ (9.49), nego $\Psi(x,t)$; dakle, valna amplituda koja zadovoljava odgovarajuću valnu jednadžbu gibanja za svako vrijeme t.

10.1 Vremenska ovisnost i propagacija vala

Za *specijalni slučaj* kada je valna funkcija jedan jedini (monokromatski) ravni val, $\Psi(x,0)=\psi_k(x,0)=e^{ikx}$, znamo da mu je vremenska evolucija oblika (9.35). To jest, kao što smo već prije istakli, $\Psi(x,t)=\psi_k(x,t)=\psi_k(x,0)\,e^{-i\omega t}$ je jedno posebno rješenje *slobodne* vremenski ovisne Schrödingerove jednadžbe (8.62), kao i *slobodne* Klein-Gordonove jednadžbe (8.60), te obične valne jednadžbe (8.61), na pr. za slobodni elektromagnetski val. Međutim, disperzijska je relacija, tj. zavisnost frekvencije $\omega=\omega(k)$ o valnom broju k, različita u svakom od tih slučajeva, pa će i vremenski razvoj (propagacija, širenje) vala biti različit.

Općenita funkcija $\Psi(x,0)$ je Fourierovim integralom (9.49) data kao super-

pozicija mnogih ravnih valova $\psi_k(x,0)$. Zato je prirodno pretpostaviti da je tako i za općeniti čas t, samo što je tada svaki ravni val dat izrazom (9.35) za općeniti t, pa njihovom superpozicijom dobivamo općenito *slobodno* rješenje:

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\,\psi_k(x,t)\,dk = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\,e^{ikx-i\omega(k)t}\,dk\,. \qquad (10.1)$$

("Slobodno rješenje" je naravno skraćeni izraz za "rješenje slobodne valne jednadžbe". Ali koje? Ovdje nama najvažnije slobodne Schrödingerove, ili slobodne Klein-Gordonove, ili slobodne elektrodinamske (fotonske), ili neke četvrte, pete ili desete linearne valne jednadžbe? To određuje $\omega(k)$, to jest, koja konkretna disperzijska relacija vrijedi u slučaju kojeg odaberemo – vidi dolje.)

Budući da amplitudnu funkciju $b(k)$ dobivamo Fourierovom transformacijom (9.49) iz zadate početne valne funkcije $\Psi(x,0)$, integralna formula (10.1) daje rješenje problema vremenskog razvoja slobodnih valnih funkcija $\Psi(x,t)$.

Pritom se u izrazu (10.1) pretpostavlja samo valjanost superpozicije, pa je onda vremenski razvoj, odnosno propagacija općenitog vala $\Psi(x,t)$, data vremenskim razvojem (propagacijom) superponiranih pojedinih monokromatskih komponenti $\psi_k(x,t)$.

Naime, očekujemo da valni paket u obliku Fourierovog razvoja (10.1) u ravne valove $\psi_k(x,t)$, mora biti rješenje gore navedenih valnih jednadžbi jer su homogene i **linearne**, a za takve vrijedi opće svojstvo superpozicije: sume rješenjâ su opet rješenja, a i rješenja pomnožena skalarom su također rješenja.

I zaista, ako se (10.1) uvrsti u valne jednadžbe (8.60)-(8.62), lako se pokaže da je svaka zadovoljena za odgovarajuću disperzijsku relaciju $\omega = \omega(k)$. U slučaju tih kvantnih jednadžbi, to znači i odgovarajuću vezu između energije $E = \hbar\omega$ i impulsa $p = \hbar k$. Malo niže ćemo to i eksplicite provjeriti za ovdje najvažniji slučaj, naime za Schrödingerovu jednadžbu za nerelativističke kvantne čestice. Međutim, u kontekstu općenitih matematičkih razmatranja nespecificiranih valova, ono što može pobuditi sumnju je to da valna funkcija $\Psi(x,t)$ u (10.1) ovisi o dvije varijable, x i t, a u (10.1) je data Fourierovim integralom po samo jednoj varijabli, valnom broju k. Zna se da Fourierova transformacija funkcije dvije varijable glasi

$$\Psi(x,t) \;=\; \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \widetilde{b}(k,\omega')\,e^{ikx-i\omega' t}\,dk\,d\omega'\,. \qquad (10.2)$$

Ovdje je ω' nijema varijabla integracije koja je poput prave frekvencije konjugirana vremenu t. Međutim, ako je za amplitudnu funkciju $\widetilde{b}(k,\omega')$ jedini uvjet da bude matematički korektan Fourierov transformat proizvoljne funkcije $\Psi(x,t)$, onda (10.2) ne daje automatski rješenje niti jedne od slobodnih jednadžbi (8.60)-(8.62) jer niti funkcija $\exp(ikx - i\omega' t)$ nije njihovo fizikalno rješenje ako vrijednosti varijabli integracijâ k i ω' nisu odgovarajuće povezane. Naime, one moraju biti povezane tako da djelovanje slobodnih jednadžbi gibanja na ravni val reproducira odgovarajuće disperzijske relacije $\omega = \omega(k)$, odnosno veze – ili (9.38), ili (9.39) ili (9.40) – između energije $E = \hbar\omega$ i impulsa $p = \hbar k$ slobodnih kvantnih čestica. Dakle, radi se o tome da frekvencija nije slobodna, nego je njena vrijednost uvjetovana iznosom valnog broja k. Ta ovisnost frekvencije o k mora odgovarati nekoj od relevantnih disperzijskih relacija $\omega = \omega(k)$: (9.38) za relativistički masivni kvanton, ili (9.39) za bezmaseni kvanton kao što je foton, ili (9.40) za nerelativistički masivni kvanton. Zato smo naglasili k-ovisnost frekvencije eksplicitnim pisanjem $\omega(k)$ u jednostrukom Fourierovom transformatu (10.1) na koji se dvostruki integral (10.2) reducira kada se amplituda $\widetilde{b}(k,\omega')$ u njemu izrazi kao

$$\widetilde{b}(k,\omega') \;=\; \delta(\omega' - \omega(k))\,(2\pi)^{1/2}\,b(k)\,. \tag{10.3}$$

Naime, $\widetilde{b}(k,\omega')$ mora iščezavati za sve vrijednosti ω' koje ne odgovaraju disperzijskoj relaciji $\omega(k)$ za dati fizikalni slučaj. U (10.2), $\delta(\omega' - \omega(k))$ "ubije" integraciju po ω' tako da za $\Psi(x,t)$ ostane jednostruki integral (10.1) u kojem je $\omega(k)$ data ili relacijom (9.38), ili (9.39), ili (9.40). Kada na takve $\Psi(x,t)$ djelujemo (tim istim redom) linearnim operatorima: slobodnim Klein-Gordonovim $\hat{\mathscr{K}_0}$ (8.60), ili klasičnim valnim tj. D' Alembertovim $\Box$ (8.61), ili slobodnim Schrödingerovim $\hat{\mathscr{S}_0}$ (8.62), te s njima uđemo pod integral (10.1), oni (za sebi odgovarajuću disperzijsku odnosno E-p relaciju) daju nulu na svim superponiranim ravnim valovima u integralima (9.40). Tako vidimo da ne samo ravni valovi $\psi_k(x,t) \propto \exp(\mathrm{i}kx - \mathrm{i}\omega t)$, $\forall\, k$, nego i sve njihove superpozicije, tj. svi slobodni valni paketi $\Psi(x,t)$ (10.1), $\forall\, b(k)$, zadovoljavaju slobodne jednadžbe: ili Klein-Gordonovu (8.60), ili klasičnu valnu (8.61), ili, u slučaju slobodnih nerelativističkih kvantona, slobodnu Schrödingerovu jednadžbu (8.62).

Taj posljednji slučaj nam je najrelevantniji, jer ovdje nam je glavni cilj uvod u *nerelativističku* kvantnu fiziku. Zato pokažimo i eksplicitnim računom da

je (10.1) rješenje slobodne Schrödingerove jednadžbe (8.62):

$$\hat{\mathscr{S}_0}\,\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\left(\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) e^{\mathrm{i}kx-\mathrm{i}\omega(k)t}\,\frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \qquad (10.4)$$

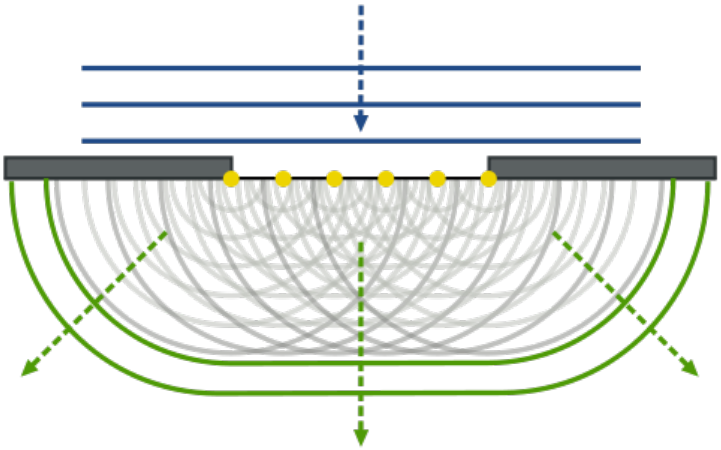
$$= \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\left(\hbar\,\omega(k) - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\right) e^{ikx-i\omega(k)t}\,\frac{dk}{\sqrt{2\pi}} = 0\,. \qquad (10.5)$$

To vrijedi općenito, za svaku amplitudnu funkciju $b(k)$ u impulsnom, tj. k-prostoru, zbog iščezavanja podintegralne funkcije za svaku vrijednost k, jer tu su na snazi disperzivna i E-p relacija (9.40) za nerelativistički masivni kvanton.

10.2 Zapis vremenskog razvoja valne funkcije pomoću propagatora

U izrazu (10.1) za valni paket $\Psi(x,t)$ u *svakom* času t, jedina *a priori* nepoznata stvar je amplitudna funkcija $b(k)$, no nju možemo dobiti Fourierovom transformacijom (9.50) čim je funkcija Ψ zadana u jednom času, recimo $t = 0$. Dakle, prema izrazu (10.1) dovoljno je znati $\Psi(x,0)$, valnu funkciju u početnom času (9.49), da bismo dobili $\Psi(x,t)$ za svaki, općeniti čas t (vidi (10.6)). To jest, ne treba nam vremenska derivacija funkcije Ψ u početnom času da riješimo problem početnih uvjeta. To ne izgleda dobro, bar *ne automatski* dobro, **ako** je valna jednadžba za Ψ *drugog* reda u vremenskoj derivaciji. No, ovdje se nećemo dalje baviti pitanjem kako se relacija (10.1) ipak može koristiti i onda, kada je valna jednadžba drugog reda u vremenu, kao na primjer u elektrodinamici (što možete pogledati u Sekcijama 7.8 i 7.9. Jacksonove "Classical Electrodynamics" [30]).

Međutim, ako je valna jednadžba *prvog reda* u vremenu, za rješenje problema početnih uvjeta je bez daljnjega dovoljna početna vrijednost samo funkcije, tj. $\Psi(x,0)$. To upravo i jest slučaj za ono što nas zanima u konačnici – za nerelativističke valove vjerojatnosti. Znamo da za nerelativističke energije, ravni valovi $\psi_k(x,t)$ zadovoljavaju slobodnu Schrödingerovu jednadžbu (8.62), a ona je *prvog reda* u derivaciji po vremenu. Ona je i linearna, pa ju zato zadovoljava i općeniti valni paket $\Psi(x,t)$; to jest, i (10.1) je rješenje, budući da je superpozicija bazičnih rješenja - ravnih valova (8.3).



Slika 10.1: Huygensov princip za slučaj kada prepreka djelomično blokira širenje vala, pa valna funkcija $\Psi(x',0) \neq 0$ samo na otvoru. Tu međutim predstavlja izvor za slobodno širenje valne funkcije $\Psi(x,t)$ u donjoj poluravnini, u skladu s izrazom (10.7). (Izvor: Arne Nordmann (norro, CC BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=1944668)

Dakle, barem za nerelativističke valove vjerojatnosti je relacija (10.1) svakako u redu, pa uvrštenjem Fourierovog transformata (9.50) u nju, možemo ovako izraziti vremensku evoluciju općenite *slobodne* valne funkcije Ψ:

$$\Psi(x,t) \;=\; \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\; e^{ikx-i\omega(k)t}\int_{-\infty}^{\infty} dx'\,\Psi(x',0)\;e^{-ikx'}\,. \tag{10.6}$$

Sređivanje gornjeg izraza omogućuje da se općenito rješenje problema početnih uvjeta valne jednadžbe prvog reda u vremenskoj derivaciji zapiše

$$\Psi(x,t) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dx'\,K(x,x';t)\,\Psi(x',0)\,, \tag{10.7}$$

gdje je slobodni **propagator** (Greenova funkcija slobodne valne jednadžbe)

$$K(x,x';t) \;=\; K(x-x';t) \;=\; \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\; e^{\,i\,k\,(x-x')\,-\,i\,\omega(k)\,t}\,. \tag{10.8}$$

Zapis evolucije vala u obliku (10.7) je realizacija **Huygensovog principa** – da u točki x u času t, valna amplituda $\Psi(x,t)$ nastaje superpozicijom svih amplitudâ $\Psi(x',t')$ u ranijem času $t'<t$, primjerice $t'=0$, vidi Sliku 10.1.

Preciznije, $\Psi(x,t)$ nastaje zbrajanjem/integriranjem (10.7) inkrementalnih (ovdje - diferencijalnih) doprinosâ $\Psi(x',0)dx'$ iz svake točke prostora x':

$$d\Psi(x,t) \;=\; K(x,x';t)\,\Psi(x',0)\,dx'\,. \tag{10.9}$$

Stoga (10.7) sa (10.9) predstavlja kontinuiranu verziju superpozicijskog izraza za valnu funkciju (7.7), pri čemu je (10.9) kontinuirani anlogon nekog parcijalnog doprinosa Ψ_n u (7.7).

Zanimljivije je što (10.9) i (10.7) jasno pokazuju kako sâma amplituda $\Psi(x',0) \equiv \Psi(x',t'=0)$, iako poznata u svakoj točki x', nije dovoljna da definira nastajanje amplitude $\Psi(x,t)$, nego je potrebna i "konstanta proporcionalnosti" $K(x,x';t)$ između njih, koja opisuje širenje ("propagaciju") utjecaja iz x' u x za vremenski interval t. To dovodi do potrebe za proširenjem pojma amplitude vjerojatnosti, čemu je posvećena iduća podsekcija.

10.2.1 Generalizacija kvantnih amplitudâ i pravilâ računanja s njima

Osobitost kvantnih valova je naravno Bornova interpretacija – da valna funkcija $\Psi(x,t)$ ima značenje amplitude vjerojatnosti za događaj nalaženja kvantne čestice u točki x u času t. Propagator K je pak nešto drugačija vrsta amplitude vjerojatnosti, za drugačiji događaj. Naime, $K(x,x';t)$ je amplituda da se kvantna čestica (točnije, njena amplituda vjerojatnosti nalaženja Ψ) proširi, tj. *propagira*, od x' do x u vremenskom intervalu t.

Naravno, vremenski razvoj kvantnih valnih funkcija određuje vremenski ovisna Schrödingerova jednadžba. S time je naravno u skladu i odgovarajući propagator* i razvoj kojeg on diktira kroz Huygensov princip (10.7). No ovdje nam je baš forma (10.7) posebno zanimljiva, jer ne samo da je u skladu s principom superpozicije (7.7), nego (10.7), kao i (10.9), kaže i ovo: **ako se neki događaj može rastaviti na korake karakterizirane njihovim pojedinačnim amplitudama vjerojatnosti, ukupna se amplituda dobije njihovim množenjem**.

Podebljani tekst o amplitudama vjerojatnosti namjerno govori apstraktno, jer sada smo došli do razine kada taj pojam možemo poopćiti. Iako smo

*Slobodni propagator (10.8) odnosno (10.19) je naravno samo jedan specijalni slučaj.

se do sada najviše bavili valnim funkcijama u položajnom prostoru u jednoj ili više dimenzija, tj. amplitudama $\Psi(x,t)$ ili $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ za nalaženje kvantona u točki x ili $\boldsymbol{r}$, očito postoje i amplitude za drugačije događaje. Evo smo malo prije došli do $K(x,x';t)$ – amplitude vjerojatnosti za propagiranje od točke do točke prostora tokom vremena. A ranije, kada smo valne funkcije iz koordinatnog prostora Fourier-transformirali u impulsni prostor, našli smo da je $b(k)$ (9.50), ili ekvivalentno $\widetilde{\Psi}(p)$ (9.53), amplituda vjerojatnosti za nalaženje (izmjerbu) da kvantna čestica ima valni broj k, odnosno (linearni) impuls $p=\hbar k$. Može se baviti i amplitudama vjerojatnosti da izmjerimo neke vrijednosti i drugih fizikalnih veličina, poput energije. Na višim razinama znanja treba se baviti i veličinama do kojih ovdje još nismo ni došli, poput orbitalnog impulsa vrtnje l i spina s.

Dakle, poopćimo sve to na apstraktni pojam amplitude vjerojatnosti Φ_Γ za svaki mogući događaj Γ, poput spomenutih:

$$\Phi_\Gamma = \Psi(x,t),\ \widetilde{\Psi}(p),\ \Psi(\boldsymbol{r},t;l,s),\ d\psi(x'),\ K(x,x';t),\ K(\boldsymbol{r},t\,;\boldsymbol{r}',t'),\ \ldots\,,\text{itd.} \tag{10.10}$$

Za njih i za računanje s njima vrijede ova [35, 38], sustavno izrečena,

Temeljna načela kvantnih amplitudâ vjerojatnosti

1. Svakom događaju Γ pridružena je amplituda vjerojatnosti Φ_Γ. Apsolutni kvadrat te amplitude daje vjerojatnost tog događaja:

$$\mathscr{P}(\Gamma) \;=\; |\Phi_\Gamma|^2\,. \tag{10.11}$$

(Vjerojatnost $\mathscr{P}$ tu shvaćamo općenito, to jest da uz konačne vjerojatnosti poput P (7.14)-(7.15) za nalaženje kvantona u konačnim intervalima, obuhvaća i infinitezimalne vjerojatnosti (7.5), te gustoće vjerojatnosti (7.4).)

2. Ako se neki događaj Γ može dogoditi na više alternativnih načina $n=1,2,3,...$, kojima pripadaju njihove vlastite amplitude vjerojatnosti Φ_n, tada za događaj Γ ukupna amplituda iznosi

$$\Phi_\Gamma \;=\; \sum_n \Phi_n\,, \quad \text{a to } \textbf{kroz (10.11) daje interferenciju}\,. \tag{10.12}$$

Tu sumu treba shvatiti poopćeno, tako da obuhvaća i kontinuirane slučajeve, kao što je integral u Huygensovom principu (10.7). Iako, najjasniji primjeri

jesu diskretni, naime ukupni Ψ (7.9) kod interferencije na dvije rupice (gdje samo $n = 1, 2$) i poopćenje (7.7) toga na proizvoljni broj doprinosa n.

(Međutim, ako se neki eksperiment (mjerenje, opažanje) čini tako da može određivati koje od alternativa n u (10.11) se zapravo događaju, to iz (10.12) $\mathscr{P}(\Gamma) = |\sum_n \Phi_n|^2$ briše interferenciju, te vjerojatnost događaja $\mathscr{P}(\Gamma)$ (10.11) postaje obična, klasična suma vjerojatnosti svih alternativa:

$$\mathscr{P}(\Gamma) \,=\, \sum_n \,|\Phi_n|^2 \,=\, \sum_n \,\mathscr{P}_n \,. \tag{10.13}$$

Ilustrativan a jednostavan primjer takvog slučaja raspravili smo u riješenom Zadatku 7.4, gdje $\Phi_n = \Psi_n(x)$ i $\mathscr{P}_n = G_n(x)$, $(n = 1, 2)$, i gdje se interferencija na detektorskom zaslonu gubi ako se ujedno detektira i kroz koji prorez kvantne čestice prolaze.)

3. Ako se neki događaj Γ može dekomponirati na dva ili više pojedinačnih sukcesivnih događaja $j = 1, 2, \ldots, \texttt{zadnji}$, od kojih se svaki može karakterizirati amplitudom vjerojatnosti Φ_j, tada se ukupna amplituda Φ_Γ dobiva njihovim množenjem:

$$\Phi_\Gamma \,=\, \prod_{j=1}^{\texttt{zadnji}} \,\Phi_j \,. \tag{10.14}$$

Istaknimo bitnu razliku probabilističke kvantne mehanike u odnosu na deterministička klasičnu mehaniku, gdje se rješavanjem jednadžbi gibanja dolazi do oštro određenih putanja. Nasuprot tome, sva temeljna pravila **1**, **2** i **3** odnose se na kvantne amplitude vjerojatnosti i dobivanje vjerojatnosti događaja. Dakle, kvantna teorija daje predviđanje samo o vjerojatnostima te o onome što se pomoću njih može izračunati, a to su, u smislu teorije vjerojatnosti, prosječne (očekivane) vrijednosti fizikalnih veličina, poput (7.16), (7.17) i (8.63).

Pravilo (10.14) o množenju amplituda vjerojatnosti pruža zgodnu priliku da se malo vratimo na fotone. Naime, njihov prolazak kroz niz polarizatorâ

daje jednostavan primjer načela (10.14), a bez potrebe da se bavimo složenim suptilnostima kako definirati analogon valne funkcije za kvantnu česticu poput fotona – bez mase i s vektorom polarizacije. (Te suptilnosti i jesu razlog što smo se kod razvoja formalizma kvantne teorije koncentrirali na masivne kvantone poput elektrona.)

Zamislimo dakle snop polariziranih fotona koji trebaju proći kroz niz od N polarizatora, a Φ_j je amplituda vjerojatnosti prolaska kroz j-ti polarizator. Prema (10.14), ukupna amplituda vjerojatnosti prolaska fotona je

$$\Phi_\Gamma \,=\, \prod_{j=1}^{N} \Phi_j \,=\, \Phi_N \, \Phi_{N-1} \, ... \, \Phi_2 \, \Phi_1 \, . \tag{10.15}$$

I bez ikakve konkretnije informacije o "propusnosti" tih polarizatora j, relaciju (10.15) možemo napisati još malo informativnije. Jasno je da amplituda vjerojatnosti prolaska kroz j-ti polarizator ovisi o tome kakva je polarizacija dolaznog fotona (koju je odredio prethodni, $j-1$vi polarizator), ali i kako je u odnosu na nju zakrenut j-ti polarizator. Stoga $\Phi_j = \Phi_{j,j-1}$. Početnu polarizaciju označimo s 0, recimo zato što ju je odredio nekakav "nulti polarizator". Onda svaki tako polariziran foton ima amplitudu vjerojatnosti $\Phi_1 = \Phi_{10}$ za prolazak kroz prvi polarizator, a $\Phi_2 = \Phi_{21}$ za prolazak kroz drugi polarizator, itd. Na primjer, ako su samo dva polarizatora u nizu [38], ukupna amplituda je

$$\Phi_\Gamma \,\equiv\, \Phi_{20} \,=\, \Phi_{21} \, \Phi_{10} \, . \tag{10.16}$$

Za općenit broj polarizatora,

$$\Phi_{N0} \,=\, \prod_{j=1}^{N} \Phi_{j,j-1} \,=\, \Phi_{N,N-1} \, \Phi_{N-1,N-2} \, ... \, \Phi_{21} \, \Phi_{10} \tag{10.17}$$

je amplituda vjerojatnosti da foton prođe kroz svih N polarizatora.

No ne zaboravimo da smo do pravila **3** o množenju amplitudâ sukcesivnih događajâ prvobitno, već iznad (10.10), došli kroz vrlo različitu fizikalnu situaciju, naime kroz propagator K masivne kvantne čestice u integrandu (10.9) Huygensovog principa: $d\Psi(x) \,=\, \prod_{\psi(x',0)dx'}^{K(x,x';t)} \Phi_j \,=\, K(x,x';t)\, \Psi(x',0) dx'$. Sâm Huygensov princip (10.7) je primjer za kombinaciju pravila **3** i pravila **2** (za kontinuirani slučaj).

10.2.2 Analitički izraz za propagator (10.8) za slobodnu Schrödingerovu jednadžbu, te njegove primjene

Za slobodnu Schrödingerovu jednadžbu, $\omega(k) = \hbar k^2/2m$. Uvrštenjem te disperzijske relacije u (10.8) i primjenom tabličnog integrala

$$\mathcal{I} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a\,y^2}\; e^{-b\,y} dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{b^2/4a} \qquad (\mathfrak{Re}\, a > 0) \tag{10.18}$$

na integral[†] u jednadžbi (10.19), dobivamo izraz za **Schrödingerov** (tj. nerelativistički) **slobodni propagator** u zatvorenom, analitičkom obliku:

$$K(x-x'\,;t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\; e^{i\,(x-x')\,k\,-\,i\,\frac{\hbar\,t}{2\,m}\,k^2} = \sqrt{\frac{m}{i\,2\pi\,\hbar\,t}}\; e^{i\,\frac{m(x-x')^2}{2\,\hbar\,t}}\,. \tag{10.19}$$

Njegova primjena u "Huygensovoj" relaciji (10.7) daje nerelativističku vremensku evoluciju općenitog slobodnog kvantnog stanja, to jest, rješenje slobodne vremenski ovisne Schrödingerove jednadžbe za bilo koju početnu valnu funkciju.

Zadaci na kraju poglavlja uključuju i primjer gaussovski modulirane početne valne funkcije $\Psi(x', 0)$, koja uz propagator (10.19) omogućuje analitičku integraciju "Huygensove" relacije (10.7) i krajnji rezultat za $\Psi(x, t)$ u zatvorenom obliku. (Za rješenje zadatka, vidi u Liboffovoj [18] Sekciji 6.1 od primjera "Distortion of the Gaussian State in Time" do kraja te sekcije.) On analitički pokazuje i prijelaz na limes klasičnog gibanja slobodne masivne čestice. Naravno, još je važnije da analitički pokazuje i ponašanje valne funkcije slobodne čestice u kvantnom režimu. To je širenje kvantnog valnog paketa s vremenom, tj. fenomen *disperzije kod valova vjerojatnosti*. Taj rezultat pokazuje i da vremenski razvoj (10.8) rješenjâ Schrödingerove jednadžbe poštuje $\forall\, t$ uvjet normalizacije (7.13) kvantnomehaničke valne funkcije $\Psi(x, t)$.

Međutim, vremensku evoluciju valnih funkcija koju ti zadaci ilustriraju ponekad čak i analitičkim formulama za širenje (disperziju) valnih paketa, kvalitativno ćemo osobito dobro razumjeti nakon što u sljedećim sekcijama steknemo dovoljno iskustva s općenitim pojmom disperzije.

[†]Na početku, u integrandu dodamo mali realni pozitivni broj ϵ imaginarnoj jedinici, $i \to i + \epsilon$, da se osigura konvergencija integrala u (10.19). Nakon integracije (10.18), puštamo $\epsilon \to 0$. Dokaz tabličnog integrala (10.18) daje riješeni zadatak 6.5 u Liboffu [18].

10.3 Utjecaj disperzije na propagiranje valnih paketa

Najjednostavniji vremenski razvoj složenog vala (10.1) imamo za najjednostavniju disperzijsku relaciju, kada je omjer $\omega(k)/|k|$ **konstanta**, tj. kada je veličina fazne brzine v_f neovisna o k:

$$\frac{\omega(k)}{|k|} \equiv v_f = \text{konstanta} = v\,. \tag{10.20}$$

Naime, tada se sve monokromatske komponente $\psi_k(x,t)$ u superpoziciji $\Psi(x,t)$ (10.1) gibaju brzinom jednake veličine v. Zato se te komponente ne razilaze, ne *disperziraju*, nego sve ostaju zajedno, u *grupi* koja se cijela giba istom brzinom koju zato nazivamo *grupnom*. Dakle, u takozvanom *nedisperzivnom slučaju* (10.20), fazna je brzina jednaka *grupnoj*, $v_f = v = v_g$, jer se cijeli valni paket $\Psi(x,t)$ [tj. grupa superponiranih ravnih valova] giba tom brzinom v. Da budemo sasvim precizni, te ukažemo i na ulogu usmjerenja fazne brzine, koje ovisi o predznaku valnog broja k, Fourierov integral (10.1) prepisujemo kao

$$\Psi(x,t) = \int_0^\infty b(k)\,\frac{e^{i|k|(x-v\,t)}}{(2\pi)^{1/2}}\,dk + \int_{-\infty}^0 b(k)\,\frac{e^{-i|k|(x+v\,t)}}{(2\pi)^{1/2}}\,dk \tag{10.21}$$

$$= \; f_+(x-v\,t) + f_-(x+v\,t)\,. \tag{10.22}$$

Prema tome, u slučaju bez disperzije, val $\Psi(x,t)$ (10.1) je općenito dat linearnom kombinacijom putujućih valova $f_+(x-v\,t)$ i $f_-(x+v\,t)$ (9.45) koji se određenom brzinom v propagiraju *bez distorzije* prema $+\infty$ odnosno $-\infty$. (Vidi početak Sekcije 9.3 i Sliku 9.3.)

Takvi valovi doista postoje; elektromagnetski valovi *u vakuumu* se svi, bez obzira na frekvenciju odnosno valnu duljinu λ, šire istom brzinom svjetlosti c, koja je jedna od fundamentalnih konstanti prirode. To je najpoznatiji primjer nedisperzivnih valova, kada je disperzijska relacija (10.20) egzaktno $\omega = c\,k$, to jest $\nu = c/\lambda$.

Međutim, već za elektromagnetske valove u mediju (materijalu), takva jednostavna disperzijska relacija (10.20) je samo aproksimacija. Tada univerzalnu vakuumsku brzinu svjetlosti c zamjenjuje brzina koja, zavisno o ma-

terijalu, slabije ili jače ovisi o valnom broju k odnosno frekvenciji ω:

$$\frac{\omega(k)}{|k|} = v_f(k)\,. \tag{10.23}$$

(Kod elektromagnetskih valova je uobičajeno to pisati preko *indeksa loma* $n(k)$, koji ovisi o materijalu: $v_f(k) = c/n(k)$.)

U tom slučaju (10.23), razne monokromatske komponente $\psi_k(x,t)$ u Fourierovoj superpoziciji $\Psi(x,t)$ (10.1) imaju razne fazne brzine, pa se nakon nekog vremena počnu zamjetno razilaziti, *disperzirati*. Tada val $\Psi(x,t)$ više nema jednostavno ponašanje (10.22), nego se tokom vremena razvijaju deformacije, *distorzije* prvotnog oblika valnog paketa $\Psi(x,0)$. U slučaju izraženijeg odstupanja $v_f(k)$ od konstante, one mogu brzo postati značajne, a i pojam grupne brzine v_g se tada mora uvesti pažljivije, nezavisno od faznih brzinâ (10.23).

Kod elektromagnetskih valova, u mnogim je problemima $v_f(k)$ bar približno konstanta i disperzija bar približno zanemariva, a u vakuumu uopće ne postoji. Međutim, nas ovdje zanimaju kvantni valovi vjerojatnosti, za koje lako vidimo da disperzija uvijek postoji. Naime, u nerelativističkom slučaju energija slobodne čestice mase m je $E = p^2/2m$, a kako $E = \hbar\omega$ i $p = \hbar k$, disperzijska relacija za nerelativističke valove vjerojatnosti je

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}\,. \tag{10.24}$$

Fazna brzina nerelativističkih valova vjerojatnosti dakle nije ni blizu konstanti, nego o k ovisi linearno,

$$v_f(k) = \frac{\hbar|k|}{2m}\,. \tag{10.25}$$

Zato je fenomen disperzije i distorzije valnih paketa tu uvijek prisutan. To je jedna indikacija da tu ni u kom slučaju ne možemo izbjeći pitanje dobre definicije brzine valnog paketa kao cjeline, tj. već spomenute grupne brzine v_g. Druga indikacija za to je da je fazna brzina (10.25) valova vjerojatnosti pridruženih čestici mase m, zbog $p = \hbar k$ jednaka tek *polovici* klasične brzine ($v_{\mathrm{CL}} = p/m$) takve čestice:

$$v_f(k) = \frac{p}{2m} = \frac{v_{\mathrm{CL}}}{2}\,, \tag{10.26}$$

a očekujemo da brzina valnog paketa, dakle grupna brzina v_g, na neki način reproducira brzinu klasične čestice.

Sa spomenutim pitanjima povezano je i pitanje, koje valne jednadžbe zadovoljavaju kakvi valovi, a osobito kvantni valovi vjerojatnosti? Lako se provjeri da nedisperzivni valovi, koji se kreću jedinstvenom brzinom v (10.20), egzaktno zadovoljavaju poznatu valnu jednadžbu (2.10) (koja je ujedno i bezmasena granica jedne relativističke kvantne jednadžbe, naime Klein-Gordonove) za bilo koji funkcijski oblik Ψ ako je on funkcija argumenta $\zeta_{\pm v}(x,t) = x \mp vt$:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x \pm vt) - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi(x \pm vt) = 0\,. \tag{10.27}$$

Ali, zbog njihove disperzije, tj. ovisnosti iznosa fazne brzine o iznosu valnog broja, $v_f = v_f(k)$, ta jednadžba očito nije zadovoljena za valove vjerojatnosti, osim naravno za svaku pojedinu harmoničku komponentu (9.35) zasebno, tj. kada $\Psi(x \pm vt) = \psi_{\mp|k|}(x,t)$ je monokromatski ravni val. No, ako je kvantna čestica nerelativistička, vidjeli smo već u pretprošlom poglavlju da ravni valovi zadovoljavaju i slobodnu *Schrödingerovu jednadžbu*; a kako je ona linearna, vidjeli smo da ju zadovoljavaju i općenita slobodna rješenja oblika (10.1) jer su dobivena superpozicijom tih harmoničkih monokromatskih modova $\psi_k(x,t)$. Oni zadovoljavaju i Schrödingerovu jednadžbu s konstantnim potencijalom, $V = const.$ No kada kasnije dođemo do ne-konstantnih potencijala, vidjet ćemo da je prostorna ovisnost rješenja vrlo različita od ravnih valova i njihovih superpozicija.

Međutim, prije svega ćemo u sljedećoj sekciji iznijeti poopćenje dosad izloženog dijela valnog formalizma na slučaj realnog svijeta, dakle na tri prostorne dimenzije.

10.4 Poopćenje na tri prostorne dimenzije

Slučaj jedne dimenzije, s jednom prostornom koordinatom x, lako poopćimo na više dimenzija. Recimo, u tri je dimenzije vektor položaja $\boldsymbol{r}$ dat s tri koordinate. U kartezijanskom sustavu, $\boldsymbol{r} = (x,y,z)$. Isto tako, umjesto valnog broja k, u tri dimenzije imamo uređenu trojku, **valni vektor** $\boldsymbol{k} = (k_x, k_y, k_z)$, pa prijelazom u tri dimenzije $kx \to k_x x + k_y y + k_z z = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}$. Ravni

val u tri prostorne dimenzije, *i u času* $t = 0$, je dakle

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}, 0) \equiv \varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = A_3\, e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{10.28}$$

$$= (A_1)^3\, e^{ik_x x}\, e^{ik_y y}\, e^{ik_z z} = \varphi_{k_x}(x)\, \varphi_{k_y}(y)\, \varphi_{k_z}(z)\,. \tag{10.29}$$

U analogiji s razmatranjima u jednoj dimenziji, već smo pri kraju Sekcije 6.2 vidjeli da je taj ravni val, pomnožen odgovarajućim vremenskim faktorom $\exp(-i\omega(|\boldsymbol{k}|)\,)$, rješenje *slobodne* trodimenzionalne Schrödingerove jednadžbe (6.22), odnosno slučaja $V = 0$ općenite vremenski ovisne trodimenzionalne Schrödingerove jednadžbe, naime općenite valne jednadžbe (8.23) nerelativističke kvantne mehanike u tri prostorne dimenzije.

Slično kao u jednoj dimenziji, faktor normiranja ravnog vala u tri dimenzije,

$$A_3 = (A_1)^3 = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\,, \tag{10.30}$$

potječe od normiranja $\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ na Diracovu delta funkciju, ali trodimenzionalnu, koja je po definiciji

$$\delta^{(3)}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') = \delta(k_x - k'_x)\, \delta(k_y - k'_y)\, \delta(k_z - k'_z) \tag{10.31}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}}\, dx\, dy\, dz = \iiint \varphi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r})^*\, \varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\; d^3r\,. \tag{10.32}$$

Valni broj i njegov simbol k poprimaju značenje veličine tog vektora:

$$k = |\,\boldsymbol{k}\,| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}\,. \tag{10.33}$$

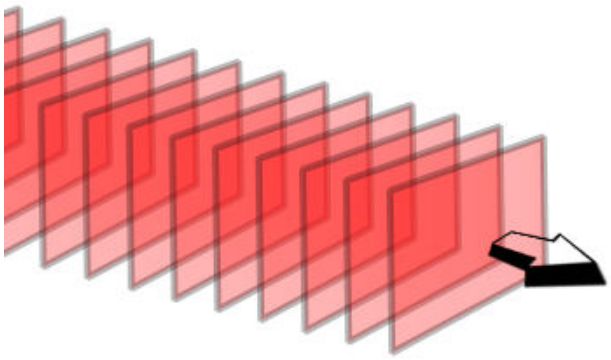
(Uočite izvjesnu promjenu notacije s obzirom na jednu dimenziju gdje valni broj $k \in [-\infty, +\infty]$, pa tamo ima značenje kao sada komponenta $\boldsymbol{k}$ duž jedne osi, na pr. k_x).

Za proizvoljno vrijeme t, ravni val u tri dimenzije je

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - i\omega t}\,. \tag{10.34}$$

Analogno relaciji (9.42) u jednoj dimenziji,

$$\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t \tag{10.35}$$



Slika 10.2: Prikaz uzastopnih ravnina iste faze u trodimenzionalnom prostoru. (Izvor: *Onde_plane_3d.jpg*: Fffred derivative work: Quibik, Public domain, via Wikimedia Commons)

je faza koja određuje funkciju ravnog vala (10.34). U svakom trenutku t, $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}, t)$ je konstantan na površinama određenim uvjetom da faza $\phi_{\boldsymbol{k}}$ ima neku konstantnu vrijednost. To također znači $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r}$ = konstanta, pa su te površine *ravnine* okomite na $\boldsymbol{k}$ (na pr. vidi Sliku 10.2).

Naime, na svakoj takvoj ravnini, projekcija vektora $\boldsymbol{r}$ na $\boldsymbol{k}$,

$$r_{||} = \frac{\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r}}{k} = \frac{\text{konstanta}}{k}\,, \tag{10.36}$$

je odgovarajuća konstanta koja daje udaljenost od ishodišta do ravnine. Takve ravnine određene, konstantne faze, nazivamo *valne fronte*. S druge strane, Slika 10.2 zorno objašnjava zašto su funkcije (10.34) prozvane ravnim valovima.

Brzina kojom se valne fronte gibaju je određena uvjetom da je faza (10.35) konstantna na takvoj ravnini, pa joj derivacija iščezava kao u 1-dim. relaciji (9.43):

$$\frac{d\phi_{\boldsymbol{k}}}{dt} = \boldsymbol{k} \cdot \frac{d\boldsymbol{r}}{dt} - \omega \equiv \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{v}_f - \omega = 0\,. \tag{10.37}$$

Dakle, sada imamo *vektor* fazne brzine

$$\boldsymbol{v}_f \equiv \frac{d\boldsymbol{r}}{dt}\,. \tag{10.38}$$

Označimo s $\boldsymbol{e}_n$ jedinični vektor u smjeru širenja vala,

$$\boldsymbol{k} = |\,\boldsymbol{k}\,|\,\boldsymbol{e}_n \equiv k\,\boldsymbol{e}_n\,. \tag{10.39}$$

Iz relacije (10.37) tada slijedi poopćenje relacije (10.23) za faznu brzinu na 3-dim. slučaj:

$$\boldsymbol{e}_n \cdot \boldsymbol{v}_f(k) = \frac{\omega(k)}{k}\,. \tag{10.40}$$

Vidimo da je sada $\omega(k)/k$ komponenta fazne brzine okomita na valnu frontu. To možemo izraziti i ovako: pomoću projekcije $\boldsymbol{r}$ na $\boldsymbol{k}$ (10.36), ravni val (10.34) pišemo ovako:

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{ik[r_{||}-(\omega/k)t]}\,, \tag{10.41}$$

što pokazuje da je $\omega(k)/k$ brzina kojom se povećava $r_{||}$ s obzirom na ravninu konstantnog $\psi_{\boldsymbol{k}}$.

Očiglednom generalizacijom odgovarajuće 1-dim. relacije (9.49), općenitu valnu funkciju u čas $t = 0$, "valni paket" $\Psi(\boldsymbol{r}, t = 0)$, možemo prikazati kao trodimezionalni Fourierov integral, tj. superpoziciju ravnih valova (10.34) s raznim valnim vektorima $\boldsymbol{k}$:

$$\Psi(\boldsymbol{r},0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint b(\boldsymbol{k})\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{k} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint b(\boldsymbol{k})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}d\boldsymbol{k}\,. \tag{10.42}$$

Ovdje je $d\boldsymbol{k} \equiv d^3k = dk_x dk_y dk_z = dV_k$ volumni element u prostoru valnih vektora (tj. impulsnom prostoru, do na faktor $\hbar^3$), dok je $b(\boldsymbol{k}, t)$ tzv. Fourierov transformat funkcije $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$. Kao i u jednoj dimenziji, to je amplitudna funkcija koja kaže koliko je pojedini ravni val s određenim valnim vektorom $\boldsymbol{k}$ (tj. pojedina *monokromatska komponenta*) zastupljen u Fourierovom integralu (10.42) koji reprezentira $\Psi(\boldsymbol{r}, 0)$. Analogno 1-dim. slučaju, ta se amplitudna funkcija dobiva iz $\Psi(\boldsymbol{r}, 0)$ (10.42) inverznom Fourierovom transformacijom.

Kao i u jednoj prostornoj dimenziji, pretpostavljamo da je vremenski razvoj, odnosno propagacija općenitog valnog paketa $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ u tri dimenzije, dana vremenskim razvojem (propagacijom) pojedinih monokromatskih komponenti $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}, t)$:

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint b(\boldsymbol{k})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-i\omega t}d\boldsymbol{k}\,. \tag{10.43}$$

To je očito 3-dim. poopćenje 1-dim. relacije (10.1), kao što je i (10.42) poopćenje 1-dim. relacije (9.49). Koliko god su ta poopćenja konceptualno,

pojmovno laka za one kojima je poznat pojam višestrukih, odnosno višedimenzionalnih integrala, ona su nas dovela do neusporedivo složenije strukture funkcije $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r},t)$ nego u jednoj dimenziji. Ta trodimenzionalna funkcija može opisivati neusporedivo složeniju situaciju ali ju je i mnogo teže tretirati čak i onda kad nema komplikacija uslijed disperzije. Naime, u 3-dim. integralima (10.42) i (10.43), općenita amplitudna funkcija $b(\boldsymbol{k})$ dozvoljava širenje vala u beskonačno mnogo smjerova $\boldsymbol{e}_n = \boldsymbol{k}/|\,\boldsymbol{k}\,|$. To je u snažnom kontrastu s mnogo jednostavnijom jednodimenzionalnom situacijom, gdje se val može širiti samo u dva smjera, i to suprotna, dakle duž iste osi, prema $+\infty$ odnosno $-\infty$. Ipak, za naše sadašnje potrebe je to posve dovoljno. Trodimenzionalni integrali (10.43) nužni su za reprezentaciju valnih paketa koji opisuju više mikro-čestica koje se šire u više različitih smjerova u tri dimenzije. Međutim, za slučaj jedne mikro-čestice, odnosno jednog valnog paketa koji se u trodimenzionalnom prostoru giba u jednom određenom smjeru $\boldsymbol{e}_{n_0}$, izraz (10.43) se reducira na svoj jednodimenzionalni analog (10.1). Naime, u tom slučaju integralu (10.43) doprinose samo valni vektori $\boldsymbol{k}$ u smjeru $\boldsymbol{e}_{n_0}$, to jest, amplitudna funkcija $b(\boldsymbol{k})$ nije nula samo za valne vektore $\boldsymbol{k}$ u tom smjeru. Tada možemo jednu koordinatnu os, recimo x, odabrati duž tog smjera, tako da $\boldsymbol{k} = k_x\,\boldsymbol{e}_x$ pa amplitudna funkcija postaje

$$b(\boldsymbol{k}) = b'(k_x)\,\delta(k_y)\,\delta(k_z)\,, \tag{10.44}$$

čime se trodimenzionalni integral (10.43) reducira na

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{-\infty}^{+\infty} b'(k_x)e^{ik_x x - i\omega(k_x)t}\,dk_x = \Psi'(x,t)\,. \tag{10.45}$$

Ovo je naravno isto što i već poznati jednodimenzionalni izraz (10.1) za funkciju $\Psi(x,t)$, uz $b'(k_x) = (2\pi)b(k_x)$ da normalizacija bude definirana na isti način, te uz $k_x \to k$ da se pojednostavi notacija.

Dakle, za naše sadašnje potrebe, naime za uvid u ponašanje jedne slobodne mikro-čestice, možemo se vratiti na jednodimenzionalne valove, bez bojazni da ćemo time izgubiti vezu s fizikom u realnom trodimenzionalnom svijetu.

10.5 Posebno jednostavan primjer valnih paketa, grupne brzine i modulacije

Čisto monokromatskim valom (9.35)

$$\psi_k(x,t) = A\, e^{i[kx-\omega(k)t]} \tag{10.46}$$

ne može se poslati nikakav signal. Signal podrazumijeva nekakvu modulaciju koja modificira ravni val ψ_k (koji je inače do beskonačnosti jednoličan, te konstantnog modula $|A|^2$ zbog $|e^{i\phi}| = 1$.) Zato se signali šalju valnim paketima, za koje smo rekli da su *grupe* superponiranih ravnih valova.

Brzina kojom se šire signali je zato brzina kojom se širi cijeli valni paket, odnosno ta grupa ravnih valova, pa ju nazivamo *grupnom brzinom* v_g.

Taj pojam ćemo za prvu ruku uvesti na najjednostavnijem primjeru koji pokazuje kako se superpozicijom više harmoničkih, monokromatskih valova (10.46), pojavljuje modulacija odnosno valni paketi. Najjednostavniji netrivijalni primjer je naravno superpozicija *samo dva* monokromatska vala:

$$\Psi(x,t) = \psi_+(x,t) + \psi_-(x,t)\,, \tag{10.47}$$

gdje su $\psi_\pm$ ravni valovi čiji se valni brojevi razlikuju za neki Δk:

$$\psi_\pm(x,t) \;=\; \frac{A}{2}\, e^{\,i\,(\,k_\pm\, x\,-\,\omega_\pm\, t\,)}\,, \qquad k_\pm = k \pm \frac{\Delta k}{2}\,, \tag{10.48}$$

i gdje $\omega_\pm = \omega(k_\pm)$. Za dovoljno malu razliku Δk (tj. bliske valne brojeve $k_\pm$), možemo zanemariti članove reda $(\Delta k)^2$ i pisati

$$\omega_\pm \;=\; \omega(k_\pm) \;=\; \omega(k \pm \frac{\Delta k}{2}) \;\approx\; \omega(k) \pm \frac{d\omega(k)}{dk}\,\frac{\Delta k}{2} \;\equiv\; \omega \pm \frac{\Delta\omega}{2}\,. \tag{10.49}$$

Tada je superpozicija (10.47)

$$\Psi(x,t) = \frac{A}{2}\, e^{i(kx-\omega t)}\, \left[e^{i(\Delta k x - \Delta\omega t)/2} + e^{-i(\Delta k x - \Delta\omega t)/2}\right]\,, \tag{10.50}$$

što možemo pisati kao produkt (ravnog) *vala nosača* (10.46) i kosinusne *modulacije*:

$$\Psi(x,t) = A\, e^{i(kx-\omega t)}\, \cos\left(\frac{\Delta k}{2}\, x - \frac{\Delta\omega}{2}\, t\right) = \Psi_{\text{nosač}}(x,t)\, \Psi_{\text{modulacija}}(x,t)\,. \tag{10.51}$$

Realni dio vala (10.51) je dan na pr. na slici *3-8 iz Eisberga i Resnicka*, pa vidimo da smo dobili dobro poznati fenomen "udarâ", koji se javlja kod superpozicije oscilacija dvije bliske frekvencije. U našoj sadašnjoj terminologiji to je *niz valnih paketa*.

Monokromatski val nosač $\Psi_{\text{nosaĉ}}(x,t) = \exp(ikx - i\omega t)$ ima frekvenciju ω i valni broj k, pa mu je fazna brzina $v_f = \omega/k = \nu\lambda$. Međutim, zbog $|e^{i(kx-\omega t)}|^2 = 1$, njegovo gibanje ne utječe na intenzitet vala, odnosno gustoću vjerojatnosti $|\Psi(x,t)|^2$, koja ne ovisi o faznoj brzini,

$$|\Psi(x,t)|^2 \;=\; |\Psi_{\text{modulacija}}(x,t)|^2 \;=\; |A|^2 \left[\cos\left(\frac{\Delta k}{2}\,x - \frac{\Delta\omega}{2}\,t\right)\right]^2 , \quad (10.52)$$

nego putuje tzv. grupnom brzinom $v_g \equiv \Delta\omega/\Delta k$. Naime, modulacija

$$\Psi_{\text{modulacija}}(x,t) = \; A\,\cos\left(\frac{\Delta k}{2}\,x - \frac{\Delta\omega}{2}\,t\right) = \; A\cos\left[\frac{\Delta k}{2}\left(x - \frac{\Delta\omega}{\Delta k}\,t\right)\right] , \quad (10.53)$$

koja val pretvara u niz valnih paketa, ima frekvenciju $\Delta\omega/2$ i valni broj $\Delta k/2$, te nam jasno pokazuje (ako pratimo, na primjer, maksimum amplitude) da se pojedini valni paket (i njegov apsolutni kvadrat) kao cjelina giba brzinom

$$v_g = \frac{\Delta\omega/2}{\Delta k/2} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} = \frac{\Delta\nu}{\Delta(\frac{1}{\lambda})} \equiv \frac{\lambda_m}{2}\,\Delta\nu\,. \quad (10.54)$$

To je *grupna brzina* za ovaj slučaj, za koji je *valna duljina modulacije*

$$\lambda_m = \frac{2\pi}{\frac{1}{2}\Delta k} = \frac{4\pi}{\Delta k}\,. \quad (10.55)$$

Pola valne duljine modulacije je očito duljina valnih paketa koji se ovdje pojavljuju:

$$\Delta x = \frac{1}{2}\lambda_m = \frac{2\pi}{\Delta k}\,. \quad (10.56)$$

Dakle, $\Delta k\,\Delta x = 2\pi$, što je u skladu s općenitom donjom granicom $\Delta k\,\Delta x \geq 1/2$ (9.55), odnosno Heisenbergovim relacijama neodređenosti. Iz relacijâ (10.51) i (10.56) jasno vidimo da će za relativno bliske frekvencije odnosno valne brojeve (tj. za $\Delta k \ll k$ odnosno $\Delta\omega \ll \omega$) valni paketi biti razmjerno dugi u odnosu na λ, valnu duljinu nosećeg vala. U suprotnom slučaju, valni

paketi će biti relativno kratki – dakle, pojedini valni paket će sadržavati samo nekoliko valnih duljinâ λ.

Sve ovo vrijedi i u općenitom slučaju, zbog općenite relacije (9.55), tj., $\Delta k \geq 1/(2\Delta x)$. Za pulseve odnosno valne pakete koji nisu prenaglo odsječeni, $\Delta k\, \Delta x$ nije jako daleko od donje granice 1/2. Dakle, kratki valni paketi (prostornog protegnuća tek par puta većeg od valne duljine λ) imaju široku distribuciju Δk valnih brojeva monokromatskih valova. I obratno, iz istog su razloga dugi harmonički valni paketi (prostornog protegnuća od mnogo valnih duljina, $\Delta x \sim n\lambda$ gdje $n \gg 1$) *gotovo monokromatski*.

10.6 Vremenska evolucija i grupna brzina općenitog valnog paketa

Budući da disperzija očito može biti vrlo važna za ponašanje valnih paketa, razmotrimo njihov vremenski razvoj. Proizvoljni puls odnosno valni paket u času $t = 0$, na pr. onaj prikazan na Slici 9.4 (ili na pr. slici 7.13 u najnovijem izdanju Jacksona [30]) giba se protokom vremena (kao što je to prikazano, na primjer, na slici 6.6 u Liboffu [18] ili pak slici 7.15 u najnovijem izdanju Jacksona [30]). Komponente s raznim valnim brojevima k, odnosno frekvencijama $\omega(k)$, općenito se gibaju raznim faznim brzinama $v_f(k) = \omega(k)/k$. Zato se valni paket obično distorzira s vremenom, tj. postepeno se razilazi i mijenja oblik. Stoga očekujemo da bi se kao cjelina mogao propagirati znatno drugačijom brzinom od, recimo, prosjeka faznih brzina monokromatskih komponenti koje sačinjavaju taj valni paket. (To pokazuje i u prethodnoj sekciji već izneseni specijalni primjer superpozicije dva monokromatska vala.) Sasvim općeniti slučaj, koji bi uključivao i mogućnost jako disperzivnog medija, ili vrlo oštrog pulsa sa širokom distribucijom valnih brojeva Δk, predstavlja vrlo težak problem. Međutim, znatno su lakši slučajevi gdje valni paketi nemaju preširok spektar Δk, ili gdje promjena frekvencije s valnim brojem nije predaleko od konstante. Tada se propagaciji valnog paketa može u dobroj **aproksimaciji** pristupiti preko razvoja frekvencije oko najzastupljenijeg valnog broja k_0, tj. valnog broja $k = k_0$ za koji je $b(k)$ maksimalan:

$$\omega(k) = \omega_0 + \frac{d\omega(k_0)}{dk}\,(k - k_0) + \ldots\,. \tag{10.57}$$

Ovdje $\omega_0 \equiv \omega(k_0)$, a "..." znači da smo odbacili član

$$\frac{1}{2}\,\frac{d^2\omega(k_0)}{dk^2}\,(k-k_0)^2 \tag{10.58}$$

te više članove.

Izraz (10.1) za valni paket $\Psi(x,t)$ u općenitom času t,

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} b(k)\,e^{ikx-i\omega(k)t}\,dk\,, \tag{10.59}$$

uvrštenjem razvoja (10.57) postaje približno

$$\Psi(x,t) \;\approx\; \frac{e^{i[k_0(\frac{d\omega(k_0)}{dk})-\omega_0]t}}{\sqrt{2\pi}}\;\Psi(x-v_g t,0)\,, \tag{10.60}$$

gdje

$$\Psi(x-v_g t,0) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\,e^{ik[x-(\frac{d\omega(k_0)}{dk})t]}\,dk \tag{10.61}$$

$$\;=\; \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\,e^{ik(x-v_g t)}\,dk\,, \tag{10.62}$$

i gdje smo uveli simbol

$$v_g \;\equiv\; \frac{d\omega(k_0)}{dk} \;\equiv\; \left(\frac{d\omega}{dk}(k)\right)_{k=k_0} \tag{10.63}$$

koji očito ima značenje *grupne brzine*. Naime, iz relacija (10.62) i (10.60) vidimo da je *približna* vremenska evolucija valnog paketa ova: do na fazni faktor $exp[ik_0v_gt - i\omega_0 t]$, puls kakav je bio u času $t = 0$, tj. $\Psi(x,0)$, putuje brzinom $v_g = d\omega(k_0)/dk$ bez izmjene oblika. Dakle, u tom pulsu sve njegove monokromatske komponente kao da ostaju i kreću se zajedno, u grupi, pa $v_g = d\omega(k_0)/dk$ nazivamo grupnom brzinom.

Gornji je rezultat (10.60) instruktivno prepisati i na sljedeći način: prvo iz putujućeg paketa (10.62) izlučimo fazni faktor

$$\Psi(x-v_g t,0) = e^{ik_0(x-v_g t)}\,\Psi_{\text{modulacija}}(x-v_g t)\,, \tag{10.64}$$

gdje

$$\Psi_{\text{modulacija}}(x - v_g t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\, e^{i(k-k_0)(x-v_g t)}\, dk\,. \tag{10.65}$$

Time izraz (10.60) postaje

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{\infty} b(k+k_0)\, e^{ik(x-v_g t)}\, dk & (10.66)\\ &= \Psi_{\text{nosač}}(k_0[x - \frac{\omega_0}{k_0} t])\ \Psi_{\text{modulacija}}(x - v_g t)\,. & (10.67) \end{aligned}$$

Prema tome, približna vremenska evolucija valnog paketa $\Psi(x,t)$ može se i ovako opisati: ravni val najzastupljenijeg valnog broja $k = k_0$, odnosno frekvencije ω_0, je *val nosač*

$$\Psi_{\text{nosač}}(x,t) = \psi_{k_0}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}\,, \tag{10.68}$$

dakle ravni val fazne brzine $v_f = \omega_0/k_0$, čija je amplituda modulirana profilom $\Psi_{\text{modulacija}}(x - v_g t)$ (10.65) koji pak putuje grupnom brzinom v_g (10.63).

U gustoći vjerojatnosti se zbog apsolutne vrijednosti takav val nosač pokrati. Zato je ona data isključivo modulacijom:

$$|\Psi(x,t)|^2 \;=\; |\Psi_{\text{modulacija}}(x - v_g t)|^2\,, \tag{10.69}$$

pa se kao cjelina giba grupnom brzinom v_g.

10.7 Valni paketi kao opis kvantnih objekata

Do sada smo govorili o valovima bez interakcije, osim eventualno s konstantnim potencijalom. Osobito nas zanimaju kvantni valovi vjerojatnosti, a oni su zapravo bili glavni cilj i u prethodnom Poglavlju 9. Međutim, tamo je zadatak bio da superpozicijom dođe do složenijih valova od ravnih monokromatskih, pa se njen matematički pristup preko Fourierove analize odnosio i na valove drugačije prirode. Dakle, izlaganje u Poglavlju 9 je većinom bilo o matematičkom opisu valova općenito, osim tamo gdje smo istakli specijalni slučaj valova vjerojatnosti ili elektromagnetskih valova. U ovom poglavlju je

naglasak bio obratan, tj. većinom na kvantnim valovima. U svakom slučaju, neke općenite spoznaje o valovima lako specijaliziramo na kvantni slučaj.

Tako smo na primjer već u prvoj sekciji ovog poglavlja pokazali da proizvoljne superpozicije ravnih valova (10.1), tzv. valni paketi, za odgovarajuću disperzivnu relaciju $\omega(k)$ predstavljaju opća rješenja *slobodne* Schrödingerove jednadžbe.

U prethodnom smo pak poglavlju vidjeli da pridruživanje valnog paketa čestici implicira da nije moguće istovremeno točno odrediti položaj i impuls čestice. Naime, ako prihvatimo de Broglievu hipotezu da je svakoj čestici impulsa p pridružen val valne duljine $2\pi/k \equiv \lambda = h/p$, onda općeniti, matematički rezultat iz Fourierove analize $\Delta x\,\Delta k \geq 1/2$ (9.55) množenjem s $\hbar$ vodi do Heisenbergovih relacija neodređenosti $\Delta x\,\Delta p \geq \hbar/2$ (9.57).

I jedno i drugo ukazuje da valni paketi daju adekvatan matematički opis slobodnih kvantnih česticâ (mikro-česticâ, kvantonâ).

10.7.1 Grupna brzina valova vjerojatnosti i veza s brzinom klasične čestice

Daljnja potvrda da valni paketi daju adekvatan opis slobodne kvantne čestice jest to što iz relacija $E = \hbar\omega$ i $p = \hbar k$ slijedi da je grupna brzina (10.63) valova vjerojatnosti

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp}\,. \tag{10.70}$$

Iz toga ćemo lako vidjeti da je grupna brzina paketa valova vjerojatnosti jednaka klasičnoj brzini čestice $v_{\rm CL}$. Primijetimo usput da to vrijedi i u složenijem, relativističkom slučaju, gdje

$$E^2 \,=\, p^2c^2 + m^2c^4 \qquad \text{daje} \qquad 2E\,\frac{dE}{dp} \,=\, 2\,p\,c^2\,, \tag{10.71}$$

pa (10.70) implicira

$$v_g \,=\, \frac{pc^2}{E} \,=\, \frac{mv_{\rm CL}\,c^2/\sqrt{1-v_{\rm CL}^2/c^2}}{mc^2/\sqrt{1-v_{\rm CL}^2/c^2}} \,=\, v_{\rm CL}\,. \tag{10.72}$$

Nas međutim prvenstveno zanima nerelativistička kvantna mehanika, pa ćemo se držati jednostavnijeg, nerelativističkog slučaja, gdje su energija slobodne čestice, odnosno disperzijska relacija valova vjerojatnosti

$$E(p) = \frac{p^2}{2m}\,, \qquad \text{odnosno} \qquad \omega(k) = \frac{\hbar\, k^2}{2m}\,. \tag{10.73}$$

Prema tome, relacija (10.70), odnosno (10.63), implicira

$$v_{\mathrm{CL}} \equiv \frac{p}{m} = \frac{dE}{dp} = v_g = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} = \frac{\hbar\, k_0}{m} = \frac{p_0}{m}\,, \tag{10.74}$$

gdje smo ovaj put pažljivo naznačili da se radi o brzini definiranoj na prosječnom ili "najzastupljenijem" valnom broju k_0 (tj. onome koji Fourierovom integralu doprinosi najviše zato što je na njemu amplitudna funkcija $b(k)$ maksimalna). Opet vidimo da je to valni broj asociran s brzinom odgovarajuće klasične čestice, tako da i tu kvantna teorija ima ispravnu klasičnu granicu.

10.8 Zaključak

U ovom smo poglavlju došli do rješenja slobodne vremenski ovisne Schrödingerove jednadžbe za bilo koju valnu funkciju zadatu u početnom trenutku.

Kako je ovo posljednje poglavlje prije matematičkih Dodataka A i B (koji su ionako predviđeni samo za one slučajeve kada čitatelj treba pojačati ili osvježiti neka matematička predznanja), osvrnimo se ukratko na izloženo gradivo i u ostalim dijelovima knjige, te čemu ono može najbolje poslužiti kao temelj. Nakon gradiva bitnog za razumijevanje strukture materije, temeljne kvantne prirode zračenja i prijelaza s klasične na kvantnu fiziku, vrlo se detaljno izložila *uvodna* kvantna teorija na primjerima najjednostavnijih vezanih i nevezanih kvantnih sustava. Izlaganje se temelji na valnoj slici, ali je dovoljno općenito da posluži kao temelj na kojem se na idućoj, diplomskoj razini, kvantna teorija može razvijati deduktivno, iz postulata kvantne fizike, iako izlaganje ovdje počinje *ab ovo*.

Konkretno: prva četiri poglavlja objašnjavaju empiričku motivaciju za postojanje kvanata energije i kvanata elektromagnetskog polja – kvantnih "čestica svjetla", te što se već time objašnjava, iako bez uvođenja novog teorijskog

formalizma. U petom je poglavlju izloženo kako je na temelju Rutherfordovog eksperimentalnog uvida u strukturu atoma, Bohr pokušao postulirati kvantne dopune klasičnoj teoriji. Objašnjeni su vrlo ograničeni uspjesi tako dobivene "stare kvantne teorije", ali i njene unutrašnje kontradikcije zbog kojih je zapala u slijepu ulicu, te oni pojmovi koji su se pokazali od trajne vrijednosti jer su preživjeli, i to kao ključni, i u pravoj kvantnoj teoriji.

Izlaz prema pravoj kvantnoj teoriji otvorio je de Brogliev prijedlog da su, po uzoru na foton, i masivne mikro-čestice također objekti koji uz čestičnu, imaju i valnu prirodu; i to uz iste relacije između Planckove konstante, linearnog impulsa i valne duljine, te energije i frekvencije, kao kod fotona. U šestom smo poglavlju objasnili i to, da je odgovarajuća nerelativistička valna jednadžba – Schrödingerova jednadžba. U sedmom smo poglavlju objasnili zašto je nužno da su kvantni valovi zapravo amplitude vjerojatnosti, tako da se radi o teoriji potpuno novog tipa. Zato se u preostalim poglavljima uvodna kvantna teorija izlaže na primjerima najjednostavnijih kvantnih sustava, ali vrlo detaljno, s pažljivim ukazivanjem na veze s prošlim dijelovima gradiva, a ponekad i iz više ekvivalentnih perspektivâ.

Tako smo se približili razini gdje se kvantna mehanika može utemeljiti kao sistem nekoliko aksioma ili postulata, s tim da oni nisu postulirani *ad hoc* kao Bohrovi, nego su do sada potvrđeni svim dosadašnjim eksperimentalnim i teorijskim istraživanjima. Naime, u Poglavlju 8 rješava se vremenski neovisna Schrödingerova jednadžba, odnosno jednadžba svojstvenih stanja energije, za najjednostavnije kvantno vezano stanje i najjednostavnije nevezano stanje - slobodnu kvantnu česticu. To daje najvažnije primjere za jedan od postulata kvantne mehanike. Tu se također rješava i vremenski ovisna Schrödingerova jednadžba za najjednostavnije kvantno vezano stanje. Metodama Fourierove analize, u Poglavlju 9 od ravnih valova formiramo općenita slobodna rješenja - valne pakete, a u ovom smo poglavlju, desetom, došli do rješenja slobodne vremenski ovisne Schrödingerove jednadžbe za bilo koju valnu funkciju zadanu u početnom trenutku. Da je razvoj funkcije stanja diktiran vremenski ovisnom Schrödingerovom jednadžbom, to se može izreći kao još jedan postulat kvantne teorije.

U tom zadnjem poglavlju smo također sustavno izložili temeljna načela za računanje s kvantnim amplitudama vjerojatnosti.

Dakle, iako je ograničeno samo na primjere najjednostavnijih vezanih i

nevezanih kvantnih sustava, ovo uvodno izlaganje formalizma kvantne mehanike je dovoljno općenito da posluži kao temelj na kojem se na idućoj, diplomskoj razini, kvantna teorija može na samom početku formulirati aksiomatski, kao skup malog broja postulata. Cijeli se opseg kvantne teorije potom može sistematski razvijati deduktivnim zaključivanjem kao posljedice tih postulata kvantne fizike. To je način razvijanja i izlaganja teorije prisutan u mnogim udžbenicima kvantne fizike ne samo napredne nego i srednje razine gradiva, poput Liboffa [18] od njegovog poglavlja 3. na dalje, ili pak Levina [39]. Takav način, gdje deduktivna metoda zaključivanja dominira nad induktivnom, favorizirao je još Einstein [40].

10.9 Zadaci 10

10.1) Objasni svojim riječima zašto je rješenje problema početnog uvjeta za valove, kada je napisan u obliku (10.7), realizacija Huygensovog principa.

10.2) Dajte matematičko objašnjenje i fizikalno objašnjenje zašto je propagator (10.8) (dakle ne nužno samo Schrödingerov) jednak Diracovoj δ-funkciji za nulti vremenski interval, $t = 0$. Provjerite da analitička formula (10.19) za posebni slučaj slobodnog Schrödingerovog propagatora čuva to svojstvo u limesu $t \to 0$.

10.3) a) Po dimenzijama kombinacije konstanti $\hbar/2m$, uočite da ju se može napisati kao omjer d^2/τ, gdje je d neka skala duljine, a τ neka vremenska skala. U analitičkoj formuli (10.19) za slobodni Schrödingerov propagator načini zamjenu

$$\frac{\hbar}{2m} \to \frac{d^2}{\tau}$$

.

b) Formulu za vremenski razvoj valne funkcije (10.7) iskoristite da pomoću slobodnog Schrödingerovog propagatora (10.19) do proizvoljnog časa t razvijete početnu valnu funkciju

$$\Psi(x,0) \;=\; \frac{1}{\sqrt{a\,\sqrt{2\pi}}}\; e^{\,i\,k_0\,x}\; e^{\,-\frac{x^2}{4a^2}}\,.$$

za slučaj kada u propagatoru prostorna skala $d = a$, i

c) za slučaj kada u propagatoru prostorna skala $d \neq a$.

10.4) Poopći zadatak 8.1), i to oba dijela, a) i b), na trodimenzionalni prostor.

10.5) Pokažite da ako ne izaberemo $t' = 0$ u (10.7) i (10.8) nego držimo općenito $t > t' \neq 0$, onda (10.7) postaje

$$\Psi(x,t) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dx'\, K(x,x';t,t')\,\Psi(x',t')\,, \tag{10.75}$$

dok (10.8) postaje

$$K(x,x';t,t') \;=\; K(x-x';t-t') \;=\; \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\; e^{i\,k\,(x-x')\,-\,i\,\omega(k)\,(t-t')}\,, \quad (10.76)$$

a izraz za slobodni propagator u zatvorenom obliku (10.19) postaje

$$K(x-x';\,t-t') \;=\; \sqrt{\frac{m}{i\,2\pi\,\hbar\,(t-t')}}\;\; e^{\,i\,\frac{m(x-x')^2}{2\,\hbar\,(t-t')}}\;\;. \quad (10.77)$$

To jest, svagdje imamo samo zamjenu $t \to t-t'$.

10.6) Pokažite da Huygensov princip (10.7) odnosno (10.75), u trodimenzionalnoj verziji kaže da u točki $\boldsymbol{r}$ u času t, valna amplituda $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ nastaje superpozicijom svih amplitudâ $\Psi(\boldsymbol{r}',t')$ u ranijem času $t'<t$, što se izražava formulom

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) \;=\; \int\, K(\boldsymbol{r},t\,;\boldsymbol{r}',t')\,\Psi(\boldsymbol{r}',t')\,d^3\boldsymbol{r}'\,, \quad (10.78)$$

gdje je trodimenzionalni propagator $K(\boldsymbol{r},t\,;\boldsymbol{r}',t')$ amplituda vjerojatnosti da se kvantna čestica (točnije, njena amplituda vjerojatnosti nalaženja Ψ) proširi, tj. propagira, od $\boldsymbol{r}'$ do $\boldsymbol{r}$ u vremenskom intervalu $t-t'$.

Dodaci

Dodatak A

Osnovno o Fourierovim redovima

U ovom se Poglavlju bavimo Fourierovim redovima sistematičnije nego do sada. Kao što smo već u Sekciji (9.1) ustvrdili bez puno matematičkih razmatranja, to su *diskretne* superpozicije trigonometrijskih funkcija kojima se mogu prikazati *periodične* funkcije, poput jednostavnog primjera na Slici 9.1 (ili A.1 i A.2 u ovom poglavlju) ako nisu previše "divlje". To bi, ugrubo i slikovito "definirano", bile sve funkcije koje možemo prikazati grafom; dakle, skoro sve periodične funkcije od fizikalnog interesa [37].

U ovakvim općenitim izlaganjima Fourierovih redova, bezdimenzionalna se varijabla obično označava s x, ali u ovom smo udžbeniku u prethodnim poglavljima oznaku x asocirali s varijablom položaja, kao i t s vremenskom varijablom. No sada, na početku, želimo govoriti o apstraktnim, bezdimenzionalnim argumentima funkcijâ. A upravo takve i jesu faze $\phi(t) = \omega t$ u sinusnim i kosinusnim rješenjima (2.8) jednadžbe gibanja harmoničkog oscilatora (2.9); ili argumenti kx harmoničkih oscilacija u prostoru kad je vrijeme fiksirano (na pr. (9.21), (8.44) i drugdje); ili pak faza putujućih valova $\phi_k(x,t) = kx - \omega t$, na primjer u (8.3), (9.42), (9.48) i drugdje.

Zato označimo s ϕ bezdimenzionalnu varijablu, a s $f(\phi)$ neku njenu funkciju koja općenito može biti i kompleksna.

Funkcija $f(\phi)$ je periodična ako je definirana za sve realne vrijednosti va-

rijable ϕ, osim možda u pojedinim izoliranim točkama*, i ako postoji neki realni broj $\mathscr{P}$ takav da $\forall\,\phi$ iz domene funkcije f, vrijedi

$$f(\phi + \mathscr{P}) \;=\; f(\phi)\,. \tag{A.1}$$

(Na primjer, vidi donji dio Slike 9.2.) Takav broj $\mathscr{P}$ nazivamo *periodom* funkcije. On očito daje duljinu dijela funkcije koji se ponavlja do u beskonačnost, $\phi \in [-\infty, +\infty]$, pa svu informaciju o takvoj funkciji $f(\phi)$ imamo već na ϕ-intervalu duljine najmanje moguće vrijednosti $\mathscr{P}$, koju nazivamo *fundamentalni period*. Primjerice, sve trigonometrijske funkcije su periodične s periodom 2π. Lako se vidi (Zadatak A.1) da ako $f(\phi)$ ima period $\mathscr{P}$, onda također ima i periode $\mathtt{M}\mathscr{P}$, gdje je $\mathtt{M}$ bilo koji cijeli broj.

Želimo shvatiti **kako to da je moguće svaku periodičnu funkciju prikazati kao linearnu kombinaciju** (makar bilo potrebno beskonačno mnogo članova) **sinusâ i kosinusâ**; ili ekvivalentno, kao linearnu kombinaciju kompleksnih eksponencijalâ, kojima su $\cos\phi$ i $\sin\phi$ realni odnosno imaginarni dio: $\exp(\pm\mathrm{i}\phi) = \cos\phi \pm \mathrm{i}\sin\phi$. Jer to smo ustvrdili još u sekciji 9.1, gdje smo (bez dokaza, osim izraza (9.20)) dali i odgovarajuće izraze: redove (9.2)-(9.5) i (9.15) za periodičnu, ali inače općenitu funkciju $f(x)$.

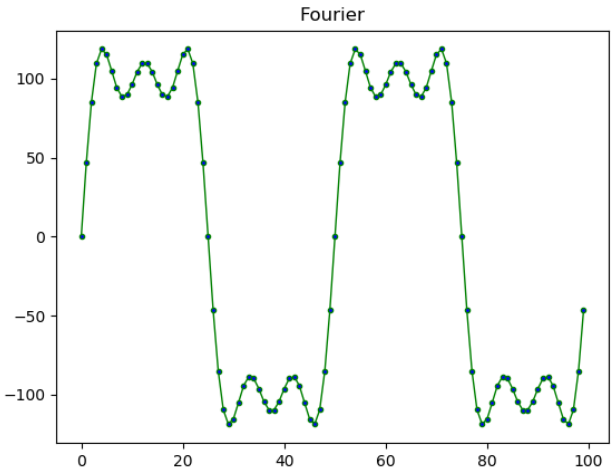
A.1 Fourierov prikaz funkcijâ fundamentalnog perioda 2π

Obrazloženje počnimo od funkcije $f(\phi)$ perioda $\mathscr{P} = 2\pi$. Za nju ekvivalent izraza (9.2), koji prikazuje funkciju $f(x)$ prostorne periodičnosti Λ, uz $\phi = 2\pi\,x/\Lambda$, glasi

$$f(\phi) \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} \left[a_n \cos(n\phi) + b_n \sin(n\phi)\right] \;=\; a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[a_n \cos(n\phi) + b_n \sin(n\phi)\right]. \tag{A.2}$$

Kao funkcije realne varijable ϕ, trigonometrijske funkcije $\cos\phi$ i $\sin\phi$ su svagdje ($\forall\phi \in [-\infty, +\infty]$) konačne i periodične s fundamentalnim periodom 2π, a očito isto vrijedi i za kompleksne eksponencijale $\exp(\pm\mathrm{i}\phi)$. Zato sve

*Sjetimo se funkcijâ kao što je tangens - nedefiniran u $\phi = \pm\pi/2, \pm 3\pi/2, \pm 5\pi/2, \ldots$.



Slika A.1: $f(\phi) = \sin(\phi) + \sin(3\phi)/3 + \sin(5\phi)/5$ je primjer Fourierovog reda (A.2) gdje samo koeficijenti b_1, b_3 i b_5 nisu 0. Ta superpozicija samo tri harmoničke komponente već počinje aproksimirati kvadratični val. (Izvor: By Saisundar.s - Own work, CC BY-SA 4.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=103131710)

informacije o tim funkcijama možemo dati pomoću njihovih vrijednosti na nekom intervalu duljine 2π. Njegov smještaj na realnoj osi je u principu proizvoljan, no najpreglednije je kad je simetričan oko ishodišta, $\phi \in [-\pi, \pi]$.

Jasno je da su te funkcije periodične i s većim periodima $2\pi\mathtt{M}$ ako su $\mathtt{M} > 1$ cijeli brojevi. Ako je pak n (neki drugi) cijeli broj, onda su s tim periodima periodične i funkcije $\sin(n\phi)$ i $\cos(n\phi)$, koje međutim imaju najmanji period $2\pi/n$. Kako n raste, svaki interval varijable ϕ je sve gušće pokriven oscilacijama funkcijâ $\sin(n\phi)$ i $\cos(n\phi)$, nezavisnih vektora baze u prostoru funkcijâ. Opet, sve to vrijedi i za kompleksne eksponencijale, pa bi se Fourierov red (A.2) mogao prevesti u ekvivalentan izraz gdje umjesto $\sin(n\phi)$ i $\cos(n\phi)$ figuriraju $\exp(\pm \mathrm{i} n\phi)$, kao u (9.15).

Uočite da se u taj **sustav trigonometrijskih funkcija** bez problema uklapa i slučaj $n = 0$. Odgovarajući sinus doduše iščezava, ali doprinos izrazu (A.2) daje $\cos(0 \cdot \phi) = 1, \forall\, \phi$, pa slučaj $n = 0$ u Fourierovim redovima doprinosi konstantu a_0. Period $2\pi/n$ je za $n = 0$ naravno neodređen, ali to je u redu, jer je konstanta periodična za svaku vrijednost perioda $\mathscr{P}$.

Dakle, očito je da se u period 2π može upasati beskonačno mnogo funkcija iz trigonometrijskog sustava $\{\sin(n\phi), \cos(n\phi)\}$, $n = 0, 1, 2, 3, ..., \infty$. Zato n nazivamo harmonički stupanj ili indeks, koji kaže koliko potpunih harmoničkih oscilacija stane u osnovni period 2π. Sve te funkcije su ograničene za sve realne vrijednosti varijable ϕ. Budući da su sve međusobno ortogonalne (vidi njihove relacije okomitosti (A.3)-(A.5)), sve su te funkcije *linearno nezavisne*. Zato svaku konačnu i dovoljno "pitomu" funkciju $f(\phi)$ možemo Fourierovim redom reproducirati do proizvoljne točnosti ako sumiramo dovoljan broj članova superpozicije (A.2), tj. do dovoljno velikog n. (Jednostavni primjer na Slici A.2 je *odabran* tako da postoje samo dva člana, $n = 1$ za sin i $n = 2$ za cos.)

Da bi beskonačna suma (A.2) uopće mogla postojati, mora konvergirati kada $n \to \infty$. Tim se matematičkim pitanjem ovdje nećemo baviti, nego ćemo pretpostaviti da koeficijenti a_n i b_n trnu dovoljno brzo za konvergenciju sume kada $n \to \infty$, pa je red (A.2) dobro definiran.

Time pretpostavljamo da je zapis (A.2) moguć, pa se problem svodi na nalaženje upravo takvih koeficijenata a_n i b_n za datu funkciju $f(\phi)$, da jednakost u (A.2) vrijedi. Tu je ključna ortogonalnost funkcijâ iz trigonometrijskog sustava $\{\sin(n\phi), \cos(n\phi)\}$, $n = 0, 1, 2, 3, ...$, a ona je definirana njihovom integracijom preko intervala periodičnosti duljine 2π.

Kako pokazuje riješeni Zadatak 7.2) , za simetrično odabrane granice integracije, od $-\pi$ do π, ta je ortogonalnost $\forall\, n$ i $\forall\, m$ data izrazima

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin(n\phi)\, \cos(m\phi)\, d\phi \;=\; 0 \tag{A.3}$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin(n\phi)\, \sin(m\phi)\, d\phi \;=\; \pi\, \delta_{nm}\, (1 - \delta_{n0})\,, \tag{A.4}$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos(n\phi)\, \cos(m\phi)\, d\phi \;=\; \pi\, \delta_{nm}\, (1 + \delta_{n0})\,, \tag{A.5}$$

gdje δ_{nm} i ovdje označava Kroneckerov simbol (7.35).

Dakle, rezultat je uvijek nula ako integriramo produkt dvije *različite* trigonometrijske funkcije, a to znači i dva sinusa i dva kosinusa ako su im harmonički indeksi različiti, $n \neq m$. No kada $n = m$, (A.4) i (A.5) daju π, to jest *polovicu* perioda 2π, u skladu s korisnom izrekom "Preko cijelog perioda, prosjek kvadrata sinusa, kao i kvadrata kosinusa, je $\frac{1}{2}$."

Slučaj $n = m = 0$ je poseban, što ističe prisutnost Kroneckera δ_{n0} u (A.5). Naravno, (A.3) i (A.4) tada daju nulu jer $\sin(0 \cdot \phi) = 0$. Međutim, $\cos(0) = 1$ pa integral u (A.5) naprosto daje cijelu duljinu intervala integracije, to jest duljinu periodičnosti 2π, jer se svodi na $\int_{-\pi}^{\pi} d\phi = 2\pi$.

Odmah slijedi da ako izraz za Fourierov red (A.2) integriramo preko intervala periodičnosti, s desna preživljava samo konstantan član ($n = 0$), pa za koeficijent a_0 dobivamo

$$a_0 \;=\; \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(\phi)\, d\phi \tag{A.6}$$

Koeficijente a_n i b_n viših, nekonstantnih članova (tj. $n = 1, 2, 3, ...$) dobivamo tako da izraz (A.2) pomnožimo s $\cos(m\phi)$ odnosno sa $\sin(m\phi)$, te integriramo preko intervala periodičnosti. U prvom slučaju, zbog (A.5) preživljava samo član s a_m, tako da

$$a_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(\phi) \cos(m\phi)\, d\phi \qquad \forall m \geq 1\,, \tag{A.7}$$

a u drugom slučaju, zbog (A.4) preživljava samo član s b_m, tako da

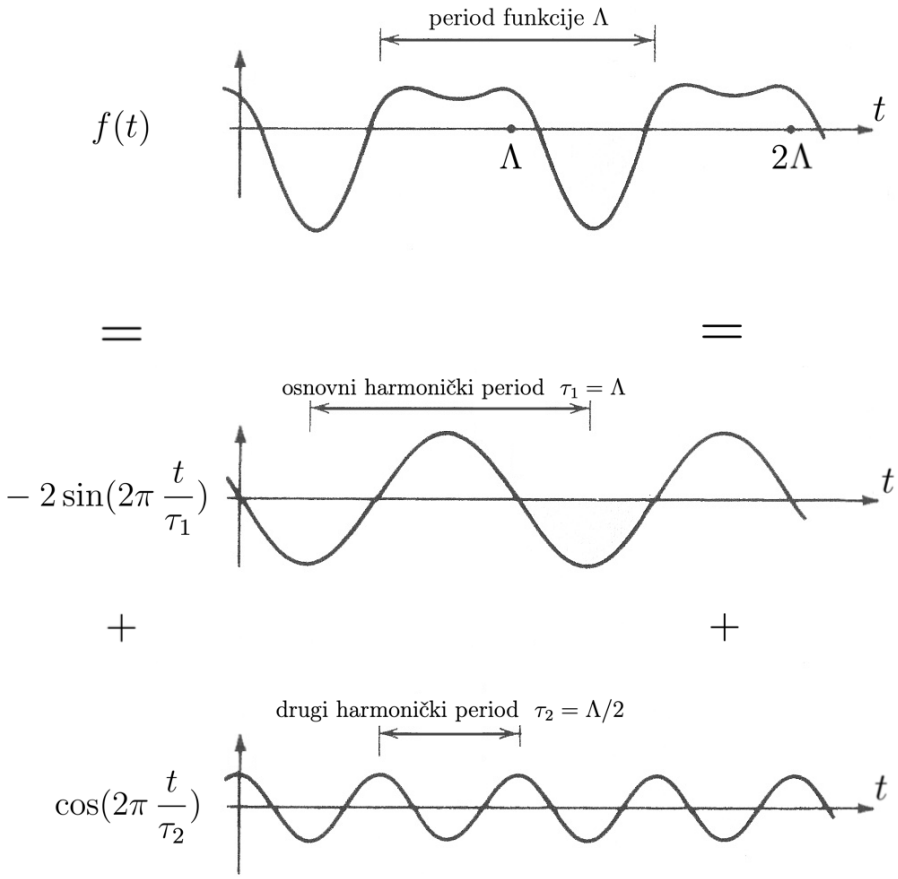
$$b_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(\phi) \sin(m\phi)\, d\phi \qquad \forall m \geq 1\,. \tag{A.8}$$

Jasno, možemo trivijalno preimenovati indekse koeficijenata, $m \to n$ svagdje.

Dakle, imamo sve konstantne koeficijente a_n i b_n potrebne za Fourierov red (A.2), što znači da zaista možemo raspisati svaku (iole "pitomu") periodičku funkciju $f(\phi)$ u harmoničke normalne modove.

A.2 Od perioda 2π do proizvoljnog perioda $\mathscr{P}$

Prisjetimo se na tren podsekcije 9.1.2 o Fourierovom razvoju općenitog rješenja Schrödingerove jednadžbe u 1-dimenzionalnoj potencijalnoj jami od $x = 0$ do $x = L$ (ili ekvivalentno, strune razapete od 0 do L). Već po tim praktičnim primjerima neperiodičkih funkcija na konačnom intervalu (i



Slika A.2: Kao najjednostavniji netrivijalan primjer Fourierovog reda (A.16) prikazan je primjer sa samo dva člana, $f(t) = -2\sin(2\pi t/\tau_1) + \cos(2\pi t/\tau_2)$, gdje su svi koeficijenti nula, **osim** $a_2 = 1$, te $b_1 = -2$.
Duljina periodičnosti funkcije $f(t)$ je Λ pa $\tau_n = \Lambda/n$, gdje $n = 0, 1, 2, ..., \infty$.
Osnovni harmonički period $\tau_1 = \Lambda$, drugi harmonički period $\tau_2 = \Lambda/2$.

to duljine $L = \Lambda/2$) vidimo da Fourierova analiza ima raznolikije primjene nego što bi se reklo po gradivu iznesenom do sada *u ovom poglavlju* o Fourierovom redu kao apstraktnom matematičkom zapisu bilo koje periodičke funkcije perioda 2π.

Kao prvo, fundamentalni period ne mora biti 2π, nego može biti potpuno proizvoljan. To najlakše vidimo ako dosadašnje izlaganje naprosto ponovimo uz ovakvo reskaliranje varijable: $\phi \to \phi\,\mathscr{P}/(2\pi) \equiv \xi$. Ono Fourierovom redu (A.2) daje sljedeći oblik u novoj varijabli ξ:

$$\phi \;=\; \frac{2\pi}{\mathscr{P}}\,\xi \quad \Rightarrow \tag{A.9}$$

$$f(\phi) \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} [\, a_n \cos(n\,\frac{2\pi}{\mathscr{P}}\,\xi) + b_n \sin(n\,\frac{2\pi}{\mathscr{P}}\,\xi)\,] \;\equiv\; f(\xi)\,. \tag{A.10}$$

Tada $\phi = 2\pi$ odgovara $\xi = \mathscr{P}$, a $f(\phi) = f(\phi{+}2\pi)$ odgovara $f(\xi) = f(\xi{+}\mathscr{P})$, kao u onom uvjetu periodičnosti (A.1) kojeg smo spomenuli najprije.

Zamjenom varijabli (A.9) u izrazima (A.6)-(A.8), granice integracije $\phi = \pm\pi$ postaju $\xi = \pm\mathscr{P}/2$, a Fourierovi koeficijenti su dati izrazima

$$a_0 \;=\; \frac{1}{\mathscr{P}} \int_{-\mathscr{P}/2}^{\mathscr{P}/2} f(\xi)\,d\xi\,, \tag{A.11}$$

$$a_n \;=\; \frac{2}{\mathscr{P}} \int_{-\mathscr{P}/2}^{\mathscr{P}/2} f(\xi)\,\cos(\frac{2\pi}{\mathscr{P}}\,n\,\xi)\,d\xi \qquad \forall n \geq 1\,, \tag{A.12}$$

$$b_n \;=\; \frac{2}{\mathscr{P}} \int_{-\mathscr{P}/2}^{\mathscr{P}/2} f(\xi)\,\sin(\frac{2\pi}{\mathscr{P}}\,n\,\xi)\,d\xi \qquad \forall n \geq 1\,. \tag{A.13}$$

Naravno, varijabla ξ i period funkcije $\mathscr{P}$ mogu biti dimenzionalni. Nas najviše zanimaju situacije kada argument funkcije ima značenje prostorne koordinate ($\xi = x$), ili pak vremenske ($\xi = t$).

Lako vidimo da nas identifikacija $\xi = x$, čime je i duljina periodičnosti prostorna: $\mathscr{P} = \Lambda = \lambda_1$, vraća na gradivo opširno izneseno u podsekciji 9.1.1, pa nema potrebe za ponavljanjem. Samo primijetimo da izrazi za Fourierove koeficijente (A.11)-(A.13) time direktno daju tamošnje izraze (9.6)-(9.8), kako je tamo obećano.

Ako $\xi = t$, funkcija $f(\xi) = f(t)$ opisuje neku vremensku ovisnost, na primjer t-ovisnost zvučnog titranja u nekoj fiksnoj točki x poput bubnjića u našem uhu. Neka je Λ *vremenska* periodičnost takve funkcije. Tada, umjesto valnih duljina λ_n, ulogu harmonikâ igraju vremenski periodi τ_n i njima odgovarajuće frekvencije $\omega_n = 2\pi\nu_n = 2\pi/\tau_n$. Oni daju periodičnost raznih modova harmoničkih oscilacija u vremenu, pa (umjesto (9.1)) imamo:

$$\Lambda \,=\, n\,\tau_n \,\equiv\, \frac{n}{\nu_n} \,=\, n\,\frac{2\pi}{\omega_n} \quad \text{gdje} \quad n = 0, 1, 2, \,\ldots\,, \infty\,. \tag{A.14}$$

Harmonički spektar je spektar koji sadrži samo komponente čije frekvencije su cjelobrojni umnošci temeljne (fundamentalne) frekvencije, u skladu s (A.14). Takve frekvencije nazivamo harmonicima. Period osnovnog harmoničkog moda ("osnovnog harmonika") je $\tau_1 = \Lambda = 1/\nu_1$, dok n-ti harmonik ima n puta kraći period τ_n, odnosno n puta višu frekvenciju ν_n.

Kao u podsekciji 9.1.1 za slučaj ovisnosti o prostornoj varijabli x, Fourierov red (A.10) i za slučaj vremenske, t-ovisnosti možemo pomoću (A.14) dati u više ekvivalentnih oblika da istaknemo uloge veličina $\Lambda, \tau_n, \nu_n, \omega_n$ i θ_n:

$$f(t) \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} \left[\, a_n \cos\left(2\pi\, n\, \frac{t}{\Lambda}\right) + b_n \sin\left(2\pi\, n\, \frac{t}{\Lambda}\right)\right] \tag{A.15}$$

$$\;=\; \sum_{n=0}^{\infty} \left[\, a_n \cos\left(2\pi\, \frac{t}{\tau_n}\right) + b_n \sin\left(2\pi\, \frac{t}{\tau_n}\right)\right] \tag{A.16}$$

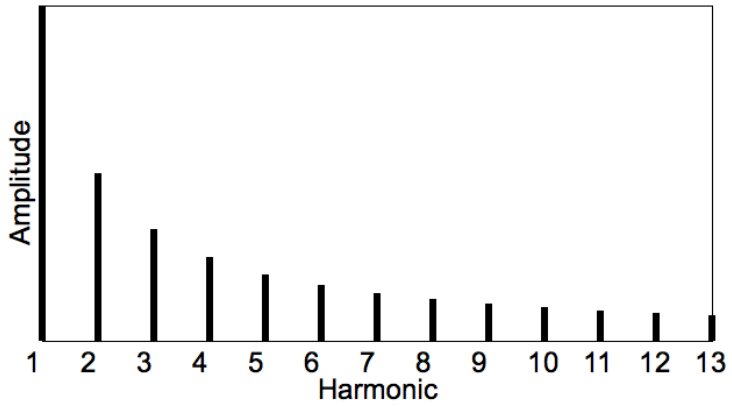
$$\;=\; A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} A_n\, \cos\left(\, 2\pi\, \nu_n\, t \,-\, \theta_n \,\right) \tag{A.17}$$

$$\;=\; \sum_{n=0}^{\infty} \left[\, a_n \cos\left(\omega_n t\right) + b_n \sin\left(\omega_n t\right) \,\right], \tag{A.18}$$

gdje su koeficijenti a_n i b_n opet dati relacijama (A.11)-(A.13), naravno uz zamjene $\xi \to t$, $\mathscr{P} \to \Lambda$. Izraz (A.17) dobiva se analogno s (9.3) u podsekciji 9.1.1, pa naravno opet $A_n \cos\theta_n = a_n$, $A_n \sin\theta_n = b_n$, te $A_n = \sqrt{a_n^2 + b_n^2}$ kada $n > 0$, te $A_0 = a_0$.

Izložimo detaljno zašto je oblik (A.17), koji uz frekvencije ν_n eksplicite sadrži i fazne pomake θ_n, posebno zoran za primjene u akustici.

Jasno je da u (A.17) n-ti član pod sumom odgovara monokromatskom valu amplitude A_n. Ima jednu jedinu frekvenciju ν_n, pa u akustici kažemo da



Slika A.3: Takozvani "idealni harmonički spektar". Harmonički je, pa sadrži samo frekvencije koje su prirodni broj puta osnovna frekvencija, $\nu_n = n\nu_1$, a kao "idealan" je definiran time što je amplituda n-tog harmonika n puta manja od amplitude osnovnog, $A_n = A_1/n$. (Izvor: By Hyacinth - Own work, CC BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=23460759)

odgovara nekom čistom tonu. U dobroj aproksimaciji takav čisti ton proizvodi *pojedina* cijev orguljâ, te pojedine suvremene elektronske sprave. No inače čiste tonove vrlo rijetko susrećemo, jer realni izvori zvuka, na primjer razni glazbeni instrumenti, obično daju zvučne valove koji su superpozicija više raznih frekvencijâ/harmonikâ - i to na način osobit za svaki instrument. Zato svaki od njih ima karakterističnu *boju zvuka* ili *timbar*, pa ih lako razlikujemo i onda kad ih sviramo na istoj "visini tona", to jest, kad im je frekvencija s najvećom amplitudom - ista. Međutim: *A)* nisu im isti relativni odnosi između amplitude $A_n^{\max}$ titranja te frekvencije $\nu_n^{\max}$ i amplitudâ $A_{n'}$, $A_{n''}, ...$ ostalih harmonikâ $\nu_{n'}$, $\nu_{n''}, ...$ koji doprinose u (A.17). *B)* Za razne izvore općenito nisu isti niti vremenski pomaci u proizvodnji n-te frekvencije zvuka (tj. relativna kašnjenja u odnosu na ostale harmonike), a koje u (A.17) opisujemo faznim pomacima θ_n.

Međutim, odavno je poznato da se orgulje (a u moderno vrijeme i elektronski sintesajzeri) mogu podesiti da oponašaju zvuk svakog drugog glazbenog instrumenta. Svaka **pojedina** cijev orguljâ je doduše najjednostavnija svirala sposobna da ispušta samo jedan ton na koji je podešena, pa ga matematički opisuje izraz $A_m \cos(2\pi\,\nu_m\,t\, - \theta_m)$ (ako je početni uvjet da u času $t = 0$ imamo amplitudu zvuka $A_m \cos(\,\theta_m)\,)$. Međutim, orgulje imaju

mnoštvo takvih cijevi na raznim frekvencijama ν_n. Relativne veličine njihovih amplituda A_n, kao i relativna kašnjenja $\theta_m - \theta_n$ u odnosu na zvuk $A_m \cos(\,2\pi\,\nu_m\,t - \theta_m\,)$ neke referentne svirale, možemo podesiti tako da njihovim istovremenim zvučanjem dobivamo zvuk bilo koje boje [37].

Fourierov red u obliku (A.17) nam dakle pruža razumijevanje od čega se zapravo sastoji ono što mi ušima doživljavamo kvalitativno kao jedan ton ali raznih prepoznatljivih "boja" zvuka - naime zvučni valovi raznih frekvencija, ali razne relativne jačine i različito pomaknute u fazi. Putem Fourierovih redova se može doći do kvantitativnih podataka o tim veličinama, pa to razumijevanje omogućuje razne tehnološke primjene. Na primjer, ovakva analiza ljudskog glasa omogućuje sigurnu metodu identifikacije govornika, kao svojevrsni akustični otisak prsta.

A.3 Zadaci A

A.1) Dokaži da ako $f(\phi)$ ima period $\mathscr{P}$, onda također ima i periode $n\mathscr{P}$, gdje je n bilo koji cijeli broj. (Dokaz: Ako je na primjer $n = 2$, $f(\phi+2\mathscr{P}) = f(\phi+\mathscr{P}) = f(\phi)$, i analogno $\forall\, n > 2$.)

A.2) Dokaži da ako su $f_1(\phi)$ i $f_2(\phi)$ periodične funkcije s periodom $\mathscr{P}$, onda je to i njihova superpozicija $\mathsf{c}_1\, f_1(\phi) + \mathsf{c}_2\, f_2(\phi)$.

Dodatak B

Osnovno o Diracovoj delta funkciji

U ovom tekstu, Diracovu delta funkciju nam je zgodno gledati kao kontinuirani analog Kroneckerovog simbola iz Poglavljâ 8 i 9, točnije Kroneckerove delta funkcije δ_{jl}, koja je funkcija dvije *diskretne* veličine (varijable) tako da iznosi 1 ako su one jednake, a inače je 0, vidi (9.18). Zato δ_{jl} "ubija" diskretnu sumu po jednoj od tih varijabli, jer preživljava samo član gdje $j = l$:

$$\sum_j \delta_{jl}\, \mathtt{f}_j \;=\; \mathtt{f}_l \,, \tag{B.1}$$

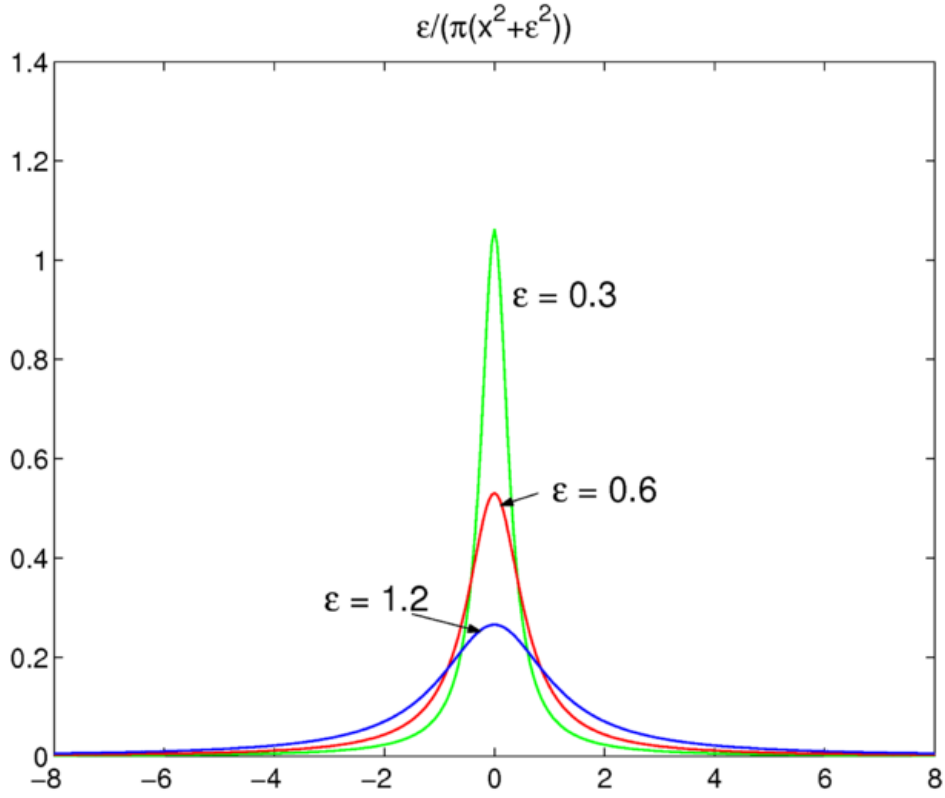
gdje smo pretpostavili da je vrijednost l sadržana u skupu vrijednosti j po kojima se sumira. Ako l tu *nije* sadržan, $j \neq l \,\forall j$, pa suma (B.1) iščezava.

Diracova delta funkcija $\delta(x-y)$ je međutim definirana na *kontinuiranoj* domeni argumenata, i to ovim relacijama:

$$\delta(x-y) \;=\; 0 \qquad \text{ako } x \neq y \,, \tag{B.2}$$

$$\int_{\mathtt{a}}^{\mathtt{b}} \delta(x-y)\, dx \;=\; \begin{cases} 1 & \text{ako je } y \text{ unutar intervala } (\mathtt{a},\mathtt{b}) \\ 0 & \text{ako } y \text{ nije u intervalu } (\mathtt{a},\mathtt{b}) \end{cases} \,. \tag{B.3}$$

Diferencijal dx je infinitezimalan, beskonačno malen, $dx \to 0$, pa mora biti



Slika B.1: Cauchyeve gustoće vjerojatnosti (Cauchy-Lorentzove raspodjele) locirane oko $x = 0$, $f_\varepsilon(x) = \varepsilon/(\pi\,(x^2 + \varepsilon^2))$, prikazane su za vrijednosti parametra skale $\varepsilon = 1.2$, 0.6 i 0.3. Njihov integral od $x = -\infty$ do $x = +\infty$ jednak je 1 za svaku vrijednost parametra skale ε, koji određuje širinu tih krivulja. Za sve manje i manje vrijednosti ε, funkcije $f_\varepsilon(x)$ čine niz koji teži u Diracovu delta funkciju $\delta(x)$ kada ε teži u 0. (Izvor: By P.wormer - Own work, CC BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=12271419)

$\delta(0) = \infty$ da bi se ispunila gornja jednakost u (B.3). Takva "funkcija" koja

$$\delta(x-y) = \begin{cases} \infty & \text{ako } x = y \\ 0 & \text{ako } x \neq y \end{cases} , \tag{B.4}$$

unatoč svom nazivu očito nije prava funkcija, nego generalizirana funkcija koja spada u tzv. **Schwartzove distribucije**. Beskonačnost $\delta(0)$ nije na intervalu konačne duljine nego samo u jednoj točki, pa ju možemo kontrolirati tako da bude $\delta(0)\,dx = 1$. I to na ovaj način: Diracovu delta funkciju definiramo kao granicu oštro zašiljene krivulje koja postaje sve viša i viša i sve uža i uža, ali *tako da površina ispod krivulje ostane konstantna* – konkretno 1. To može biti, na primjer, Cauchy-Lorentzova raspodjela (Slika B.1)), normalna (Gaussova) raspodjela (Slika B.2), ili neka druga reprezentacija Diracove delta funkcije poput niza δ_n (B.6), ilustriranog na Slici B.3, ili pak funkcija sinc (Slika B.4).

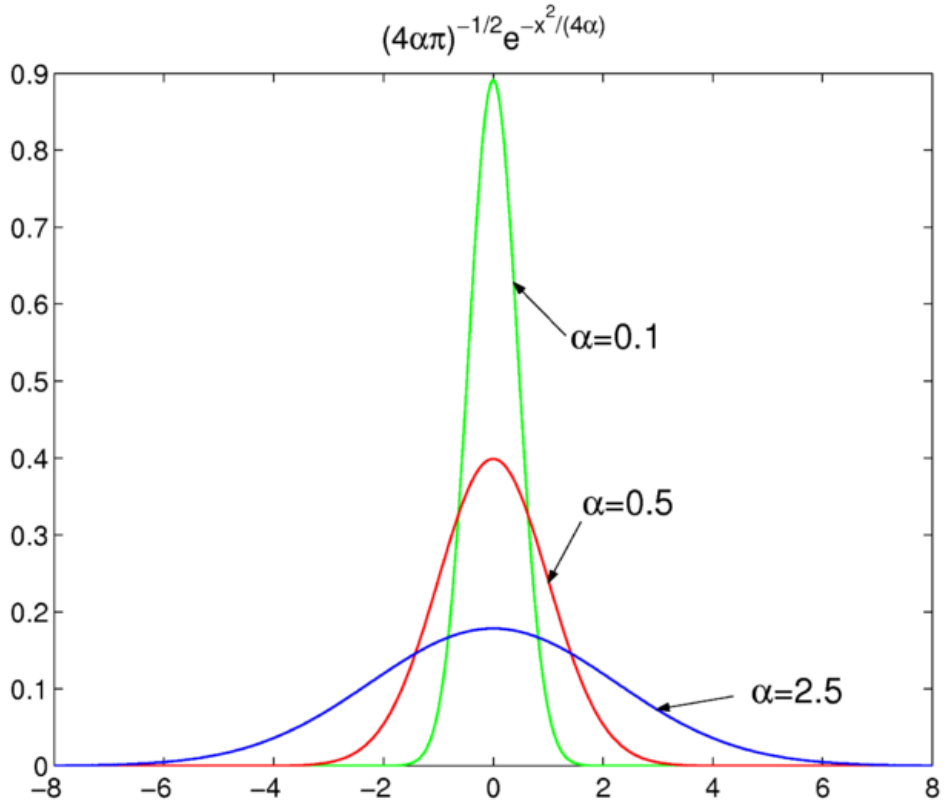
U principu nije važno koju reprezentaciju delta funkcije upotrebljavamo, nego samo da zahtjev na gore opisano ponašanje pod integralima bude ispunjeno. Tada šiljak na nuli delta funkcije odabire točku $x = y$ kao jedini doprinos integralu. Zato, na primjer, za svaku kontinuiranu funkciju $f(x)$ vrijedi

$$\int_{\mathtt{a}}^{\mathtt{b}} f(x)\delta(x-y)\,dx = f(y) \tag{B.5}$$

ako interval integracije $[\mathtt{a}, \mathtt{b}]$ uključuje točku $x = y$.

Važnost relacije (B.5) vidjeli smo u Sekciji 9.1. Tu nam je bilo bitno to njeno svojstvo u obliku relacije (9.30) koja je ista kao (B.5), samo uz specificiran interval integracije od $\mathtt{a} = -\infty$ do $\mathtt{b} = +\infty$. Nama je upravo taj slučaj najvažniji, a i najjednostavniji je, jer tada integracija očito uključuje sve točke u jednoj dimenziji.

Odaberimo sada $y = 0$, tj. slučaj simetrične Diracove delta funkcije $\delta(x)$, jer se na općeniti slučaj $\delta(x-y)$ uvijek možemo lako vratiti pomakom varijable $x \to x - y$. Međutim, sada ćemo si tim odabirom pojednostaviti pisanje, jer ćemo detaljnom konstrukcijom i primjenom jedne konkretne reprezentacije Diracove delta funkcije ilustrirati dosadašnju diskusiju, te eksplicite izvesti (B.5).



Slika B.2: Prikazane su Gaussove krivulje, tj. normalne raspodjele vjerojatnosti oko $x = 0$ za tri vrijednosti parametra koji određuje širinu Gaussijana: $\alpha = 2.5$, 0.5 i 0.1. Bez obzira na vrijednost parametra α, integral Gaussove raspodjele od $-\infty$ do $+\infty$ jednak je jedan, te ta raspodjela teži u Diracovu delta funkciju kada parametar α teži u nulu. (Izvor: By P.wormer - Own work, CC BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=12271419)

B.1 Reprezentacija Diracove delta funkcije limesom pravokutnih funkcija $\delta_n(x)$

Nazovimo δ_n ovaj niz funkcija definiranih pomoću prirodnog broja n:

$$\delta_n(x) = \begin{cases} 0 & \text{ako } |x| > \frac{1}{2n} \\ \\ n & \text{ako } |x| \leq \frac{1}{2n} \end{cases} . \tag{B.6}$$

Slika B.3 prikazuje δ_n-sekvencu, tj. funkcije δ_n za nekoliko vrijednosti n.

Niz funkcija $\delta_n(x)$ ima upravo osobine koje želimo: s povećanjem broja n, sve uži postaje interval gdje $\delta_n(x) \neq 0$, ali i funkcija $\delta_n(x) = n = const$ raste točno toliko da površina pod funkcijom ostaje ista $\forall\, n$: (širina intervala)$\times\delta_n(x) = (1/n)\, n = 1$. To sažeto izražava formula

$$\int_{\mathtt{a}}^{\mathtt{b}} \delta_n(x)\, dx = 1\,, \qquad \forall\, n\,, \tag{B.7}$$

gdje su donja odnosno gornja granica integracije bilo koji brojevi `a` između $-1/2n$ i $-\infty$, odnosno `b` između $1/2n$ i $+\infty$.

U granici $n \to \infty$, δ_n je jedna moguća reprezentacija delta funkcije:

$$\delta(x) = \lim_{n\to\infty} \delta_n(x)\,, \tag{B.8}$$

jer upotrebom (B.7) njen integral isto tako ispada konačan (i jednak 1),

$$\int_{\mathtt{a}}^{\mathtt{b}} \delta(x)\, dx = \int_{\mathtt{a}}^{\mathtt{b}} \lim_{n\to\infty} \delta_n(x)\; dx = \lim_{n\to\infty} \int_{\mathtt{a}}^{\mathtt{b}} \delta_n(x)\; dx = \lim_{n\to\infty} 1 = 1\,, \tag{B.9}$$

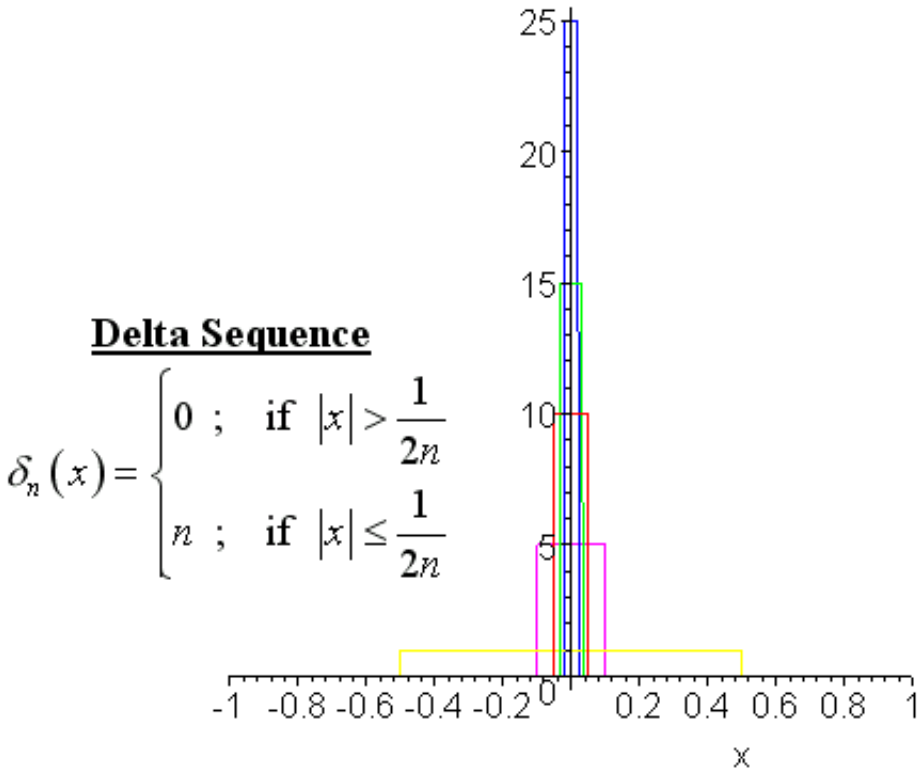
iako uzimanje limesa u (B.8) daje ∞ u točki $x = 0$ (a 0 svagdje drugdje):

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{ako } x = 0 \\ 0 & \text{ako } x \neq 0 \end{cases} . \tag{B.10}$$

Očito, (B.10) je simetrični ($y = 0$) slučaj općenite relacije (B.4), koju lako dobijemo natrag iz (B.10) redefiniranjem varijable, $x \to \xi = x - y$.

Važnu relaciju (B.5) možemo dokazati uvrštenjem reprezentacije (B.8):

$$\int_{\mathtt{a}}^{\mathtt{b}} f(x)\, \delta(x)\, dx \;=\; \lim_{n\to\infty} \int_{\mathtt{a}}^{\mathtt{b}} f(x)\, \delta_n(x)\, dx\,, \tag{B.11}$$



Slika B.3: Sekvenca, tj. niz δ_n (B.6), gdje $n = 1, 2, 3, ..., \infty$, ilustriran za $n = 1, 5, 10, 15, 20$ i 25. Kada $n \to \infty$, δ_n teži u Diracovu delta funkciju $\delta(x)$. Svaki član niza $\delta_n(x)$ ima integral jednak 1 ako uključuje interval $[-\frac{1}{2n}, \frac{1}{2n}]$.

(Izvor: By MathKnight, CC BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=14627008)

zahvaljujući tome što za svaku kontinuiranu funkciju $f(x)$ vrijedi

$$\lim_{\epsilon\to 0}\int_{y-\epsilon/2}^{y+\epsilon/2} f(x)\,dx \;=\; \epsilon\, f(y)\,. \tag{B.12}$$

Pogled na (B.6) podsjeća nas da $\delta_n(x) = 0$ **osim** u intervalu $x \in [-\frac{1}{2n}, \frac{1}{2n}]$ gdje $\delta_n(x) = n$, te kaže da ovdje imamo $\epsilon = 1/n$. Zato (B.11) daje

$$\int_{\mathtt{a}}^{\mathtt{b}} f(x)\,\delta(x)\,dx \;=\; \lim_{n\to\infty} n\int_{-1/2n}^{1/2n} f(x)\,dx = \lim_{n\to\infty} n\,\frac{1}{n}\,f(0) = f(0)\,. \tag{B.13}$$

Time smo dokazali (B.5) za simetrični slučaj ($y = 0$). No, to je ujedno i dokaz za općeniti slučaj $y \neq 0$, jer (B.13) daje (B.5) zamjenom varijabli $x \to \xi = x - y$.

B.2 Integralna reprezentacija Diracove delta funkcije

U integralnoj reprezentaciji (9.31) prepišimo interval integracije od $-\infty$ do ∞ u obliku limesa

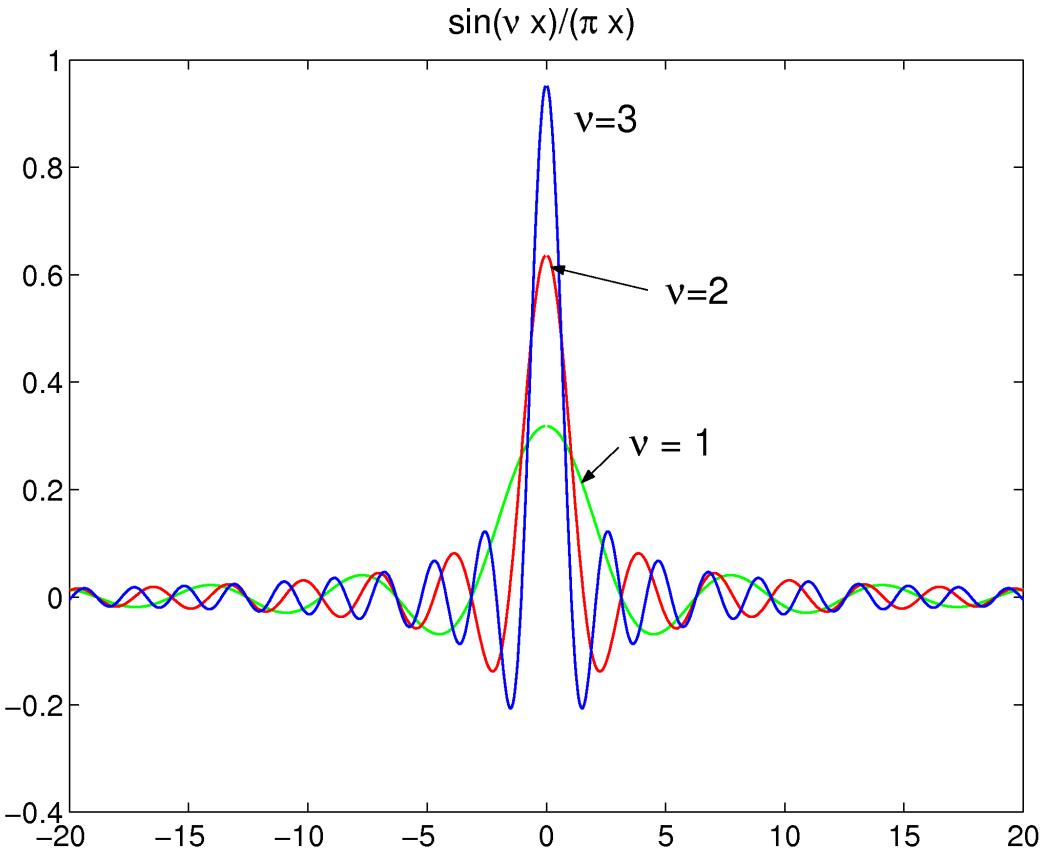
$$\delta(x-x') \;=\; \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\,i\,k\,(x-x')}\,dk \;\to\; \frac{1}{2\pi}\lim_{\nu\to\infty}\int_{-\nu}^{\nu} dk\, e^{ik(x-x')}\,. \tag{B.14}$$

U ovoj sekciji ćemo pokazati da kada su donja odnosno gornja granica integrala (B.14) data parametrom $\mp\nu$, taj integral daje (do na faktor 2π) funkciju $\mathrm{sinc}_\nu(x) \equiv \sin(\nu\,x)/(\pi\,x)$. No kako u limesu $\nu \to \infty$ ta funkcija daje jednu reprezentaciju Diracove delta funkcije, to će pokazati da i integral (9.31) zaista daje delta funkciju $\delta(x - x')$.

Opet ćemo skratiti pisanje te uskladiti notaciju sa Slikom B.4 koja prikazuje krivulje simetrične oko ishodišta (kao i ostale slike u ovom Dodatku B) uvodeći pokratu $\xi = x - x'$, te preimenovanjem $\xi \to x$. Naravno, kao i u prethodnom dijelu, to se može lako obrnuti pomakom $x \to x - x'$.

Integral po k može se izvrijedniti u zatvorenom obliku:

$$\int_{-\nu}^{\nu} dk\, e^{ikx} = \left[\frac{1}{ix}\,e^{ikx}\right]_{k=-\nu}^{k=\nu} \;=\; 2\,\frac{\sin(\nu x)}{x} \;=\; 2\pi\,\frac{\sin(\nu x)}{\pi x} \;\equiv\; 2\pi\,\mathrm{sinc}_\nu(x). \tag{B.15}$$



Slika B.4: Funkcija $\mathrm{sinc}_\nu(x) = \sin(\nu\, x)/(\pi\, x) \to \delta(x)$ kada $\nu \to \infty$. Prikazane su krivulje $\mathrm{sinc}_\nu(x)$ za tri vrijednosti parametra $\nu = 1, 2, 3$. (Izvor: By P.wormer - Own work, CC BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=12271432)

Krivulje koje odgovaraju funkciji $\mathrm{sinc}_\nu(x)$ za $\nu = 1, 2, 3$ prikazane su na Slici B.4. Opaža se da povećanje parametra ν sužava i povisuje vrh u $x = 0$. Granica $\nu \to \infty$ daje

$$\lim_{\nu\to\infty} \mathrm{sinc}_\nu(x) \;=\; \lim_{\nu\to\infty} \frac{\sin \nu x}{\pi x} \;=\; \delta(x)\,, \tag{B.16}$$

što preko (B.14) dokazuje integralnu reprezentaciju Diracove delta funkcije (9.31).

B.3 Zadaci B

1. Nađi svojstvene funkcije $\varphi_{x'}(x)$ operatora položaja $\hat{x}$, gdje je x' svojstvena vrijednost.

Rješenje:

$$\hat{x}\,\varphi_{x'}(x) \;=\; x\,\varphi_{x'}(x) \;=\; x'\,\varphi_{x'}(x)\,.$$

$$\Longrightarrow \qquad (x' - x)\,\varphi_{x'}(x) \;=\; 0\,.$$

$$\Longrightarrow \qquad \varphi_{x'}(x) \;=\; \delta(x - x')\,.$$

Dodatak C

Kazalo

A
(alfa) α-čestica/zraka 20,
amplitude (klasične) 33, 35, 64, 70
amplituda vjerojatnosti 23, 144+
atomska hipoteza 19
atomska struktura 20
atomski spektri 14+

B
Balmerova serija 14+
(beta) β-čestica/zraka 20
Bibliografija 269–272
Bohrov model 16, 85, 92+
Bohrov princip korespondencije 92
Bohrov radijus 99+
Bornova interpretacija
valne funkcije 23, 144+
bozon 47

C
centralna sila 88, 95, 114
centripetalna akceleracija 96
Comptonov efekt 19, 75+
Comptonova valna duljina 78, 80
Comptonovo raspršenje 76+
Coulombov potencijal 86+
crno tijelo 18, 27+

D
de Broglieva hipoteza 119+
de Broglieva valna duljina 120+
de Broglievi valovi 124+
delta funkcija 155, 197, 226, 255
diferencijalni operator 165
disperzija 222+
disperzijske relacije 49, 198+, 213+

E
elektromagnetsko polje (klasično
nasuprot kvantiziranom) 19, 68+
elektromagnetsko zračenje, elektromagnetski valovi 16, 18, 20, 22+
elektron 16, 20, 21, 22+, 61+, 103+,
120+, 143+

F
fenomen "udarâ" 231
fermion 47
fotoelektrični efekt 55+
foton 19, 47, 56, 68+, 75+
Fourierov red, Fourierova transformacija 128, 186+, 245

G
(gama) γ-čestica/zraka 20
Geiger 20
gustoća vjerojatnosti 23, 144+

H
Hertz, Heinrich 56
Hallwachs, W. 57
Hamiltonijan,
Hamiltonova funkcija 127
Hamiltonov operator 165+
harmonički oscilator 33, 36+, 40+, 52, 113, 161, 186, 210+
Heisenbergove relacije neodređenosti 24, 138+, 159, 206+
hipoteza o kvantima svjetlosti 55+
Huygensov princip 217+

I
infracrveni dio spektra 16
interferencija 141+, 158
interferencija na dva proreza 142, 145, 147, 159

J
jezgra, jezgreni model atoma 21, 86

K
Keplerov problem 88, 92, 95+
Klein-Gordonova jednadžba 180+
kvantna čestica 47, 70, 124, 141+
kvantna hipoteza 39
kvanton 47, 82, 141+

L
linearna jednadžba 128, 141, 147, 185
linearna kombinacija 223, 246
linearni operatori 215
linearna superpozicija 178, 185, 189
linearno nezavisne funkcije 248
Lymanova serija 16

M
Marsden 20
Mieovo raspršenje 76
Millikan, R. 57, 64
Mohorovičić, Stjepan 105
molekule 19
multiplikativni operator 167

N
Newtonovi zakoni 87, 92
Newtonove jednadžbe 95, 113
norma funkcije 148, 152
normalizacija, normiranje 149, 151
normalni modovi 34+, 48

O
očekivana vrijednost - vidi prosječna vrijednost
operator Hamiltonijana 165+
operator impulsa 164,
operator energije 164,
operator položaja/koordinate 167

operator - valni, Schrödingerov i Klein-Gordonov 181
operatorske zamjene 166

P
Planckov zakon zračenja crnog tijela 45
Planckova konstanta 16, 45, 141
polarizacija (EM polja) 35, 48, 50, 52 (p. raspodjele naboja 76)
polarizatori 220, 221
potencijal - konstantni 167, beskonačno duboki pravokutni 175
pozitronij 103
prosječna vrijednost 150, 156, 183, 220

R
Rayleigh–Jeansov zakon zračenja crnog tijela 33+
Rayleighovo raspršenje 75
Reducirana masa 103
Rutherford 21, 85, 87, 91
Rutherfordova formula 88, 91
Rutherfordovo raspršenje 86, 88, 90
Rydberg energije 103
Rydbergova spektroskopska konstanta 16, 103

S
Schrödingerova jednadžba 119, 128+, 165+
spektralne linije 14+
spektri 14+
svojstvene funkcije 164
svojstvene jednadžbe 164
svojstvene vrijednosti 172
svojstveni vektori 164

T
temeljna načela kvantnih amplituda 219
Thomsonovo raspršenje 75

U
ultraljubičasta katastrofa 18, 31+
ultraljubičasti spektar 16
ultraljubičasto zračenje 76

V
valna funkcija 22, 124, 144+
valna jednadžba 35, 125+, 161, 180+, 213+
valno-čestična dualnost 22
valovi vjerojatnosti 23, 141
vektorski potencijal 35
virijalni teorem 114

W
Wienov zakon pomaka 31
Wienovi zakoni zračenja crnog tijela 31, 32, 46

X
X-zrake (rendgenske zrake) 20, 76

Y
Youngov pokus 142

Z
zračenje crnog tijela 18, 21, 27+

Bibliografija

[1] J. J. Balmer, Ann. d. Phys. **25** (1885) 80.

[2] M. Planck, Verhandlungen d. Deutschen physikal. Gesellschaft **2** (1900) 237; M. Planck, Ann. d. Phys. **1** (1900) 69. (Vidi i republikaciju u M. Planck: "Die Ableitung der Strahlungsgesetze", Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt am Main 1995, ISBN 3-8171-3206-9, str. 56.)

[3] Vidi na pr. M. Jammer, "The conceptual development of quantum mechanics", McGraw–Hill Book Company 1966.

[4] T. S. Kuhn, "Black-Body Theory and the Quantum Discontinuity: 1894-1912", Clarendon Press, Oxford 1978.

[5] O. Darrigol, "From c-Numbers to q-Numbers: The Classical Analogy in the History of Quantum Theory", University of California Press, Berkeley 1992.

[6] A. Einstein, Ann. d. Phys. **17** (1905) 132.

[7] A. Einstein, doktorska teza, prihvaćena na Sveučilištu u Zürichu 1905.

[8] A. Einstein, Ann. d. Phys. **17** (1905) 549.

[9] A. Einstein, Ann. d. Phys. **17** (1905) 891.

[10] A. Einstein, Ann. d. Phys. **18** (1905) 639.

[11] E. Rutherford, Phil. Mag. **21** (1911) 669.

[12] N. Bohr, Phil. Mag. **26** (1913) 1.

[13] A. H. Compton, Phys. Rev. **22** (1923) 409.

[14] L. de Broglie, "Ondes et quanta", Comptes Rendus **177** (1923) 507-510; Phil. Mag. **47** (1924) 446; L. de Broglie, Ann. de physique, serie X, **3** (1925) 22.

[15] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. **79** (1926) 361; E. Schrödinger, Ann. d. Phys. **79** (1926) 489.

[16] Travis Norsen, "Foundations of Quantum Mechanics: An Exploration of the Physical Meaning of Quantum Theory" (Undergraduate Lecture Notes in Physics) Springer; 1st ed. 2017.

[17] M. Schlosshauer, J. Kofler, A. Zeilinger, "A Snapshot of Foundational Attitudes Toward Quantum Mechanics", Stud. Hist. Phil. Mod. Phys. 44, 222-230 (2013), arXiv:1301.1069 [quant-ph].

[18] R. L. Liboff, "Introductory Quantum Mechanics", Pearson Education Inc. publishing as Addison Wesley 2003, 4^{th} edition 2003.

[19] Na pr. u R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands, "The Feynman Lectures on Physics", Vol. I, Addison–Wesley Publishing Co., Reading, Massachusets, 1963.

[20] Na pr. u udžbeniku V. Šips, "Uvod u statističku fiziku", Školska knjiga, Zagreb 1990.

[21] Jean-Marc Lévy-Leblond and Francoise Balibar, "Quantics: Rudiments of Quantum Physics", North-Holland, 1990.

[22] Vidi na pr. M. Chalmers, Physics World, January 2005, 16.

[23] J. S. Rigden, Physics World, April 2005, 18.

[24] Na pr. u M. Born, *Physics in My Generation*, Pergamon Press, London 1956.

[25] R. A. Millikan, Phys. Rev. **7** (1916) 355.

[26] M. Fanciulli, J. H. Dil, SciPost Phys. **5**, 058 (2018) 1 (arXiv:1806.05895v4 [cond-mat.mes-hall]).

[27] M. Ossiander *et al.,* Nature **374** (2018) 374.

[28] J. Fuchs et al., Optica Vol. **7**, No. 2 (2020) 154 (arXiv:1907.03607 [physics.atom-ph])

[29] Za Thomsonovo raspršenje, vidi na primjer poglavlje 14, a za Rayleighovo – poglavlje 10 Jacksonove knjige o klasičnoj elektrodinamici [30].

[30] J.D. Jackson, "Classical Electrodynamics", 3^{rd} ed., John Wiley& sons 1999.

[31] R. Eisberg and R. Resnick, "Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles", John Wiley & sons, 2^{nd} edition, 1985.

[32] Vidi na pr. I. Supek, "Teorijska fizika i struktura materije", I dio, "Školska knjiga", Zagreb 1974, ili H. Goldstein, "Classical Mechanics", Addison-Wesley publishing Co. 1980, ili K.R. Symon, "Mechanics", Addison-Wesley publishing Co., 3rd edition 1971.

[33] M. Bucher, arXiv:0605258; arXiv:0705.4321; arXiv:0802.1366 (e-printi, neobjavljeni).

[34] Virijalni teorem je objašnjen u udžbenicima klasične mehanike, kao što je Goldsteinova "Classical Mechanics" iz reference [32]

[35] Na pr. u R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands, "The Feynman Lectures on Physics", Vol. III (*Quantum mechanics*), Addison–Wesley Publishing Co., Reading, Massachusets, 1963.

[36] Erwin Kreyszig, "Advanced Engineering Mathematics, 10th Edition", John Wiley & Sons, Inc, 10th edition (2018).

[37] D. K. Sunko, "Fourierovi redovi i transformati" (2022).

[38] Bjørn Felsager, "Geometry, Particles, and Fields", Springer-Verlag (1998), **Sekcija 2.3**.

[39] F. S. Levin, "An Introduction to Quantum Theory", Cambridge University Press 2002.

[40] A. Einstein, "Induction and Deduction in Physics", prevedno iz članka "Induktion und Deduktion in der Physik", Berliner Tageblatt, 25 December 1919, u "The collected papers of Albert Einstein", Vol. 7: The Berlin Years: Writings, 1918-1921, Princeton University Press 2002, https://einsteinpapers.press.princeton.edu/vol7-trans/124 .